

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física

João Vitor Nunes Santos

**PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE GELOS DE SPIN ARTIFICIAIS NA REDE
DE PENROSE**

Belo Horizonte
2023

João Vitor Nunes Santos

**PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE GELOS DE SPIN ARTIFICIAIS NA REDE
DE PENROSE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól

Belo Horizonte
2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S237p Santos, João Vitor Nunes.
Propriedades termodinâmicas de gelos de spin artificiais na rede de Penrose /
João Vitor Nunes Santos. – 2023.
71 f. : il.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 62-66.

1. Termodinâmica. 2. Metamateriais. I. Título. II. Mól, Lucas Alvares da
Silva. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 536.7 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

ATA DA SESSÃO DE ARGUIÇÃO DA 706ª DISSERTAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA, DEFENDIDA POR JOÃO VITOR NUNES SANTOS, orientado pelo professor Lucas Alvares da Silva Mól, para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA**. Às 14 horas de dezoito de agosto de 2023, por videoconferência, reuniu-se a Comissão Examinadora, composta pelos professores **Lucas Alvares da Silva Mól** (Orientador - Departamento de Física/UFMG), **Walber Hugo de Brito** (Departamento de Física/UFMG) e **Vagson Luiz de Carvalho Santos** (Departamento de Física/UFV) para dar cumprimento ao Artigo 37 do Regimento Geral da UFMG, submetendo o bacharel **JOÃO VITOR NUNES SANTOS** à arguição de seu trabalho de dissertação, que recebeu o título de **“Propriedades Termodinâmicas de Gelos de Spin Artificiais na Rede de Penrose”**. O candidato fez uma exposição oral de seu trabalho durante aproximadamente 50 minutos. Após esta, os membros da comissão prosseguiram com a sua arguição e apresentaram seus pareceres individuais sobre o trabalho, concluindo pela aprovação do candidato.

Belo Horizonte, 18 de agosto de 2023.

Prof. Lucas Alvares da Silva Mól

Orientador do aluno

Departamento de Física/UFMG

Prof. Walber Hugo de Brito

Departamento de Física/UFMG

Prof. Vagson Luiz de Carvalho Santos

Departamento de Física/UFV

Candidato: João Vitor Nunes Santos



Documento assinado eletronicamente por **João Vitor Nunes Santos, Usuário Externo**, em 23/08/2023, às 12:31, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Alvares da Silva Mol, Professor do Magistério Superior**, em 23/08/2023, às 12:44, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Walber Hugo de Brito, Professor do Magistério Superior**, em 23/08/2023, às 14:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Vagson Luiz de Carvalho Santos, Usuário Externo**, em 25/08/2023, às 14:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **2566107** e o código CRC **1569010F**.

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus, que me proporcionou força e fé para superar os desafios e seguir em frente. Aos meus pais, Sibéria e Humberto (†), por terem sido os pilares da minha vida, proporcionando o dom mais valioso que tenho, a vida. A toda minha família, que esteve ao meu lado em cada passo dessa trajetória, apoiando e torcendo pelo meu sucesso, cito em especial minhas avós e madrinhas.

Um agradecimento especial ao meu orientador, Lucas Mól, pela orientação excepcional e pela GRANDE paciência que teve comigo ao longo de todo o processo do mestrado. Suas orientações, conhecimentos e insights foram fundamentais para o desenvolvimento do meu trabalho de pesquisa.

Agradeço ao Leozin, Natália, Romeu, Douglas e Fabrício por compartilharem seus conhecimentos, entusiasmo e paixão pela física. Suas aulas e orientações foram fundamentais para o meu crescimento intelectual e a compreensão dos conceitos mais complexos. E um agradecimento especial ao meu mentor Robson, carinhosamente conhecido como "Robão do Avião", "Robinho" ou "Chefe". Sua orientação durante meus anos finais de graduação foi inestimável para o desenvolvimento do meu trabalho acadêmico. Suas dicas, conselhos e apoio constante foram fundamentais para que eu pudesse alcançar meus objetivos.

Além disso, gostaria de estender meus agradecimentos aos professores da UFMG, Luiz Gustavo Cançado (ou simplesmente "Gusta"), Ronald Dickman e João Plascak. Suas contribuições para o meu conhecimento em física foram essenciais e enriqueceram minha formação acadêmica.

Agradeço de coração à minha psicóloga, Michelle Carvalho, e à minha psiquiatra, Dr. Clarissa, pela ajuda valiosa e fundamental que prestaram a mim durante todo o período do mestrado.

Aos amigos que sempre suportaram as minhas loucuras e choradeiras: Gabriel, Pedrinho, Josi ("Josiane dos Campos"), Luana, Cláudia, Pedro, Idaiane, Alan, Ana Luiza, Brunão, Túlio Pinho, Titu, Maria Clara, Jéssica, Paulinho, Gui, Rodrigão. Aos amigos que fiz no mestrado e título como meus novos Baianos (apesar de o Pedro não ser da Bahia): Pedro (Pedrão), Mateus Cardoso ("Papai" ou "Sacana"), Ju ("Mamãe"), Joás ("Pilantra"), Will e o Gustavo ("Joinster"). Ao Vitor ("Vitão"), ao Diego ("Diegão") por fazer os dias na 3080 mais leves e engraçados. Aos amigos de Laboratório: Davi, Gabriel ("GB") e Luiz. Ao Ricardo ("Italiano") pelos insights de simulação e por sempre estar disposto a conversar.

Um agradecimento as bandas Pink Floyd, Led Zeppelin, YES, e ao ilustríssimo Belchior pelas excelentes horas de música enquanto escrevia essa dissertação.

Agradeço as agências de pesquisa FAPEMIG, CNPq e CAPES, em especial a CAPES por financiar a minha bolsa de pesquisa.

*Este trabalho é uma forma de agradecer
meus pais Humberto (†) e Sibéria
minhas avós (†), e minhas madrinhas
Ivone e Edilamar (†)
Obrigado por tudo que fazem/fizeram por mim.*

Resumo

A frustração geométrica em materiais conhecidos como gelos de spin tem despertado grande interesse entre os pesquisadores desde a última década. Esses materiais possuem momentos magnéticos que obedecem à regra do gelo magnético, semelhante à regra que as moléculas de água seguem no estado sólido. Os estudos nessa área também envolvem redes de nanoilhas magnéticas, conhecidas como gelos de spin artificiais (GSA). Essas nanoestruturas são fabricadas através de litografia eletrônica, o que permite um controle preciso de sua geometria e interações magnéticas. Diferentemente dos gelos de spin naturais, os GSA permitem a observação direta dos microestados do sistema permitindo a identificação de excitações coletivas como monopolos magnéticos e a investigação de suas propriedades. Neste trabalho estamos interessados no estudo do GSA no ladrilho de Penrose e uma análise mais aprofundada das propriedades do sistema no estudo de fenômenos termodinâmicos. A análise termodinâmica permitirá a compreensão do comportamento das grandezas termodinâmicas como energia, magnetização, calor específico e suscetibilidade magnética. Além disso, investigar a dependência dessas grandezas em relação à temperatura e aos parâmetros do sistema, proporcionando uma visão mais completa de suas propriedades.

Palavras-chave: Gelos de Spin Artificiais, Frustração Geométrica, Propriedades Termodinâmicas, Ladrilho de Penrose.

Abstract

The geometric frustration in materials known as spin ices has awakened great interest among researchers in the last decade. These materials have magnetic moments that obey magnetic ice rule, a rule similar to the one that water molecules retain in the solid state. Studies in this area also involve lattices of magnetic nanoislands, known as artificial spin ices (ASI). These nanostructures are manufactured using electronic lithography, which allows precise control of its geometry and magnetic interactions. Unlike natural spin ices, ASI allow the direct observation of the systems microstate, allowing the identification of collective excitations such as magnetic monopoles and the investigation of their properties. In this work we are interested in the study a ASI in the Penrose tile and further analysis of system thermodynamic properties. Thermodynamic analysis will allow the understanding of the behavior of thermodynamic quantities such as energy, magnetization, specific heat and magnetic susceptibility. In addition, investigating the dependence of these quantities on the temperature and system parameters, provide a more complete view of its properties.

Keywords: Artificial Spin Ice, Geometric Frustration, Thermodynamic Properties, Penrose Tiling.

Lista de Abreviaturas e Siglas

GSA – Gelo de Spin Artificial

AFM – Atomic Force Microscopy

MFM – Magnetic Force Microscopy

ASI – Artificial Spin Ice

SQUID – Superconducting Quantum Interference Device

Sumário

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Emergência	14
1.2	Fracionalização	15
1.3	Tema de Estudo	16
2	GELOS DE SPIN	17
2.1	Momentos Magnéticos	17
2.2	A Regra do Gelo	18
2.3	Gelos de Spin Naturais	19
2.4	Gelos de Spin Artificial - GSA	23
2.5	Transição de Fase em GSA's	29
2.6	Interações Magnéticas	30
2.6.1	Interação de Troca	31
2.6.2	Interação Dipolar	32
2.6.3	Anisotropia de Forma	33
3	MÉTODOS DE SIMULAÇÃO	36
3.1	Método de Monte Carlo	36
3.1.1	Algoritmo de Metropolis	37
3.1.2	O Princípio de Worm	39
4	GSA NO LADRILHO DE PENROSE	42
4.1	Estudo do Estado Fundamental	44
4.1.1	Estudos dos Vértices	45
4.1.2	Perspectivas no estudo dos GSA no ladrilho de Penrose	47
5	RESULTADOS	50
5.1	Propriedades Termodinâmicas	50
5.1.1	Condições de Contorno Abertas	51
5.1.2	As Simulações	51
5.1.3	Resultados Preliminares usando o Single Spin Flip + Worm	53
5.2	Rombos	57
6	CONCLUSÃO	61
	REFERÊNCIAS	62

APÊNDICES **67**

APÊNDICE A – PROCEDIMENTO DE CONSTRUÇÃO DO LADRILHO DE PENROSE 68

A.1 Ladrilho de Penrose 68

1 Introdução

Eu sou apenas um rapaz
latino-americano
Sem dinheiro no banco sem
parentes importantes
E vindo do interior

Apenas um Rapaz Latino
Americano - Belchior

O magnetismo está fortemente presente no estudo da física dos materiais. Isso está relacionado às aplicações práticas e tecnológicas. Ainda nos séculos XV e XVI as bússolas foram as principais ferramentas para a expansão das grandes navegações, auxiliando os navegadores a se orientarem na Terra, que em suas propriedades também é um ímã gigante turbulento [1]. Outro exemplo bastante conhecido é a gravação magnética, que funciona como armazenamento de informações em discos rígidos. Os cartões bancários também armazenam informações por meio da utilização de uma fita magnética.

Atualmente, o estudo de materiais magnéticos na escala nanométrica intensificou a criação de dispositivos que utilizam correntes magnéticas. Nesses estudos, foi considerado um material específico de "gelo de spin", que apresenta excitações coletivas emergentes que se comportam como monopolos magnéticos. Sistemas desse tipo podem ser encontrados naturalmente ou fabricados em laboratório por meio de técnicas litográficas. Apesar de a formulação usual do eletromagnetismo refutar a existências de monopolos magnéticos livres, à primeira vista, pela "*Lei de Gauss do Magnetismo*":

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \tag{1.1}$$

alguns físicos estudaram profundamente a possibilidade de surgimento de monopolos magnéticos que não violem essa lei entre os anos 1930 e 1980. Cita-se: Paul Dirac [2], Nambu [3] & Polyakov [4]. No entanto, nos gelos de spin artificiais, $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ enquanto $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} \neq 0$ e $\vec{\nabla} \cdot \vec{H} \neq 0$.

Um fenômeno observado em alguns materiais magnéticos cristalinos é a frustração geométrica. A frustração geométrica ocorre quando o sistema não consegue simultaneamente satisfazer todas as suas interações de modo que sua energia seja minimizada. Nesta dissertação, o foco principal estará voltado apenas para a frustração geométrica. Uma exemplificação bastante conhecida é dada a seguir. Considere uma rede quadrada na qual os spins do tipo Ising são alocados em seus vértices, ou seja, assumem apenas os estados

$S_i = \pm 1$, e que exista entre os vizinhos mais próximos uma interação antiferromagnética, favorecendo a orientação antiparalela dos pares de spins com seus primeiros vizinhos.

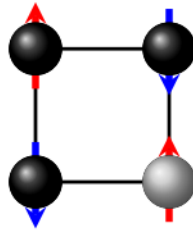


Figura 1 – As setas avermelhadas são os spins orientados para cima, as setas azuladas os spins orientados para baixo. A rede quadrada é completada ao se preencher o sítio cinza com um "spin up", de forma que, todas as interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos são satisfeitas.

Observa-se que, para uma rede quadrada, a minimização da energia do sistema não apresenta indeterminação. No entanto, se considerarmos uma rede triangular, uma indeterminação seria evidente.

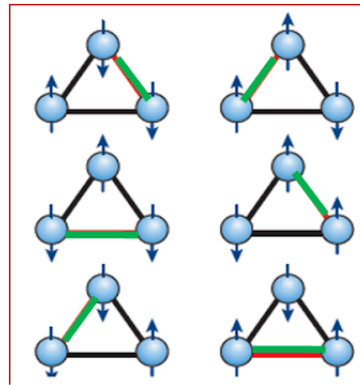


Figura 2 – Ilustração da rede triangular, com as esferas azuis representando o momento magnético. Nesta geometria há seis estados com o mesmo valor de energia. Observa-se segundo a linha verde e vermelha onde as interações são frustradas. Retirado de: <https://sites.google.com/site/grupotcfmc/>

Se fosse exigida uma interação entre vizinhos à esquerda, a interação com os vizinhos superiores não seria satisfeita, e vice-versa. Dessa forma, a geometria do sistema impossibilita a satisfação das interações e a minimização de energia. Portanto, uma rede triangular composta por spins do tipo Ising e sujeita a interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos é geometricamente frustrada. No entanto, se a interação principal fosse alternada, ou seja, se fosse ferromagnética, a frustração desapareceria.

Há um fator comum que acompanha os sistemas que possuem frustração, chamado de degenerescência. Tanto a rede quadrada quanto a rede triangular possuem estados fundamentais degenerados. A rede quadrada possui uma degenerescência dupla, pois é possível inverter todos os spins em seus vértices sem afetar a interação. Essa é, no entanto,

uma simetria presente no hamiltoniano e, portanto, deve ser esperada. A rede triangular por outro lado, possui 6 configurações no estado fundamental, como mostrado na figura (2), evidenciando um fator extra, não presente no hamiltoniano e proveniente da geometria do sistema. O estudo da frustração é interessante, pois pode ter consequências para qualquer tipo de sistema. Cita-se:

- Estado fundamental degenerado, acarretando violação da terceira lei da termodinâmica, com uma entropia residual não-nula em $\mathcal{T} = 0$.
- Surgimento de transições e/ou pseudo-transições ao sistema.
- Dinâmica lenta.

1.1 Emergência

O conceito de emergência é definido em termos de um sistema composto por inúmeros elementos e descrito por termos finitos em sua Hamiltoniana. Quando uma previsão não pode ser descrita por essa Hamiltoniana, ela é considerada um fenômeno emergente. Os fenômenos emergentes estão diretamente relacionados à física da matéria condensada¹. Nesses sistemas, as interações entre os constituintes podem se tornar competitivas em certos regimes, resultando em comportamentos incomuns. Essa competitividade nas interações é comum devido ao fato de que os constituintes podem estar desacoplados. O comportamento geral do sistema pode ser calculado usando a função de partição de um constituinte isolado do sistema.

Alguns sistemas constituintes da matéria condensada exibem soluções emergentes do tipo oscilatório, chamadas "fônons". Propriedades como o calor específico de sólidos podem ser entendidas a partir desse arcabouço. Outros exemplos de fenômenos emergentes estão relacionados aos "mágnons", "vórtices" e "skyrmions". Os mágnons são ondas de spin que surgem em redes cristalinas compostas por elétrons. Por outro lado, vórtices e skyrmions são excitações que ocorrem fora do estado fundamental, sendo de natureza topológica.

Um exemplo seria o comportamento de uma cadeia unidimensional composta por pequenos osciladores, que podem ser analogamente considerados átomos em uma rede cristalina. A ideia central é analisar os deslocamentos desses osciladores a partir de suas posições de equilíbrio. Pode-se usar duas abordagens para tal análise:

- Mecânica Quântica: Nesta abordagem, a quantização dos osciladores e a determinação de seus modos normais de vibração são realizadas através da resolução da equação

¹ Estuda e busca descrever, através das leis físicas fundamentais, o comportamento da matéria em seu estado condensado, no qual o número de constituintes e entidades fundamentais do sistema se torna grande.

de Schrödinger, exigindo o conhecimento detalhado do potencial de interação entre os osciladores.

- Fenomenologia: Nesta abordagem, são exploradas simetrias intrínsecas do sistema para simplificar a descrição. Três simetrias fundamentais foram identificadas: *Simetria de Localidade* com a interação ocorrendo apenas entre osciladores vizinhos, evitando derivadas de ordem superior nos deslocamentos. *Simetria de Estabilidade* com a concentração de deslocamentos em torno de posições de equilíbrio estáveis, excluindo termos de potência ímpar nos deslocamentos e garantindo que o coeficiente do termo de maior potência par seja positivo. *Simetria de Invariância sob Translações*, ou seja, a energia do sistema não depende da posição absoluta na cadeia, restringindo o Hamiltoniano de conter termos que dependem diretamente dos deslocamentos ou de suas potências.

Isso leva a um Hamiltoniano fenomenológico que descreve o sistema de osciladores e se assemelha ao Hamiltoniano usado para uma corda elástica, especialmente quando o número de osciladores é grande e o espaçamento tende a zero.

$$\mathcal{H} = \int \rho \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + v^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] dx \quad (1.2)$$

Além disso, uma análise da transformada de Fourier do Hamiltoniano revela uma relação de dispersão do tipo $w = vk$. Essa relação de dispersão admite comprimentos de onda maiores do que o espaçamento entre os osciladores para determinados valores dos parâmetros ρ e k . Essas soluções inesperadas e não contidas no Hamiltoniano original são conhecidas como "*soluções emergentes*".

1.2 Fracionalização

A fracionalização ocorre quando um sistema composto por um grande número de constituintes, como elétrons, átomos ou moléculas, dá origem a quasipartículas que transportam características primárias desses constituintes.

Um exemplo conhecido de fracionalização é o elétron ($1\mathcal{D}$) [5], que em certas condições pode se dividir em duas quasipartículas distintas: o spinon e o holon. O spinon carrega o spin do elétron, enquanto o holon carrega a carga do elétron. Dessa forma, o elétron é fracionalizado em duas quasipartículas que transportam características primárias, como o spin e a carga. Esse fenômeno de fracionalização ocorre em sistemas unidimensionais. Para sistemas de dimensões maiores, ($2\mathcal{D}$) e ($3\mathcal{D}$), existem outros exemplos de fracionalização. Um exemplo é o efeito Hall quântico fracionário [6], que ocorre em sistemas bidimensionais. Nesse fenômeno, ocorre a fracionalização da carga elétrica fundamental, resultando em quasipartículas com carga fracionária. Outro exemplo é o gelo de spin, que ocorre em

sistemas tridimensionais, onde surgem excitações que se comportam como monopolos magnéticos, com a fracionalização do spin ou do momento de dipolo magnético.

1.3 Tema de Estudo

O objetivo deste trabalho é realizar estudos computacionais utilizando simulações de Monte Carlo para investigar as propriedades termodinâmicas de gelos de spin definidos em ladrilhos de Penrose. O próximo capítulo abordará os gelos de spin, incluindo suas propriedades de transição de fase e as interações magnéticas envolvidas. No terceiro capítulo, serão descritos os procedimentos de simulação utilizados, como o método de Monte Carlo, o algoritmo de Metropolis e o princípio do "*Worm*". Os estudos dos gelos de spin no ladrilho de Penrose estão descritos no quarto capítulo. Os resultados obtidos a partir das simulações descritas no terceiro capítulo serão apresentados no quinto capítulo. Por fim, o sexto capítulo apresentará as considerações finais deste trabalho.

2 Gelos de Spin

There's a kid who had a big
hallucination
Making love to girls in
magazines
He wonders if you're sleeping
with your new found faith
Could anybody love him
Or is it just a crazy dream?

The Final Cut - Pink Floyd

Antes de descrever a modelagem geral utilizada neste trabalho e os resultados obtidos a partir das simulações, é importante apresentar o conceito e as propriedades dos gelos de spin artificiais (GSA). Serão abordados os passos teóricos e experimentais relevantes desse tipo de sistema, a fim de elucidar os fenômenos físicos fundamentais e descrever os aspectos que moldam a investigação do ladrilho de Penrose.

Os gelos de spin artificiais são sistemas físicos compostos por um conjunto bidimensional de momentos magnéticos interagentes, cujo comportamento coletivo mimetiza as regras de formação do gelo da água. Esses sistemas têm a capacidade de exibir um comportamento magnético altamente frustrado, semelhante ao observado no gelo da água, onde os átomos de hidrogênio ocupam uma rede cristalina de forma não trivial.

2.1 Momentos Magnéticos

O momento magnético associado a um elétron é uma propriedade fundamental da sua natureza quântica e está relacionado ao seu spin e à sua carga elétrica. O spin é uma propriedade intrínseca das partículas subatômicas, como elétrons, prótons e nêutrons, e está associado a um momento angular intrínseco.

O momento magnético de um elétron é dado pelo produto do seu spin pelo chamado "*magnéton de Bohr*", denotado por μ_B . O magnéton de Bohr é uma constante física que representa a relação entre o momento angular e o momento magnético. Matematicamente, o momento magnético $\vec{\mu}$ de um elétron pode ser expresso como:

$$\vec{\mu} = -g\mu_B\vec{s} \quad (2.1)$$

onde g é o fator g , que é uma constante de proporcionalidade que leva em conta os efeitos relativísticos e de interação eletromagnética do elétron, e \vec{s} é o operador do spin do elétron.

O momento magnético do elétron está diretamente relacionado ao comportamento magnético dos materiais. Quando os elétrons estão em um átomo ou em um material, seus momentos magnéticos individuais podem se alinhar de diferentes maneiras, dependendo das interações presentes. Esses alinhamentos dos momentos magnéticos podem levar à diferentes comportamentos magnéticos, onde os elétrons contribuem para a criação de um campo magnético macroscópico sendo o ferromagnetismo e o anti-ferromagnetismo as principais manifestações.

2.2 A Regra do Gelo

Em 1933, Bernal & Fowler realizaram medidas de difração de raio-X em uma amostra de gelo para determinar a posição dos átomos de oxigênio [7]. Eles observaram que os átomos de oxigênio estavam localizados no centro dos tetraedros da estrutura formando uma estrutura cristalina chamada pirocloro. A partir dessa descoberta, foi proposto que em cada linha que liga dois átomos de oxigênio consecutivos deveria haver um átomo de hidrogênio. Essa configuração levou à criação da regra "two-in two-out", também conhecida como regra do gelo.

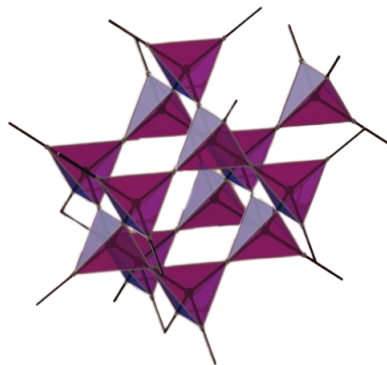


Figura 3 – Estrutura pirocloro de uma rede de gelo de spins naturais. Retirado de: [8]

A estrutura pirocloro é ilustrada na figura (4), onde os átomos de oxigênio estão representados pelos círculos brancos e os átomos de hidrogênio pelos círculos escuros. A distância entre os átomos de oxigênio na rede pirocloro é de aproximadamente 2,7 Å, enquanto a ligação entre os átomos de oxigênio e hidrogênio possui uma distância de cerca de 0,9 Å. De acordo com a regra do gelo, os dois hidrogênios que se ligam ao oxigênio no centro de um tetraedro devem ficar mais próximos dele que os outros dois hidrogênios, que se conectam, então, a outros dois átomos de oxigênio vizinhos.

Em 1933, Giaque & Ashley especularam sobre a existência de uma entropia residual no gelo da água quando a temperatura tende a zero [11]. Esse trabalho abriu caminho para Linus Pauling, em 1935, explicar a possível existência dessa entropia residual a uma

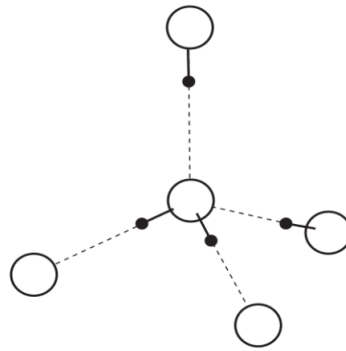


Figura 4 – Gelo da água, os círculos brancos representam os átomos de oxigênio, os círculos escuros os átomos de hidrogênio. A linha tracejada é a ligação covalente entre os átomos de oxigênio e hidrogênios afastados, enquanto, a linha cheia representa a ligação dos átomos de oxigênio e hidrogênio. Os átomos de hidrogênio ligados diretamente aos oxigênios tendem a ficar mais perto em relação aos átomos ligados aos oxigênios vizinhos. Retirado de: [9] [10]

temperatura de 0 K [12]. Pauling calculou o número total de configurações para esse tipo de sistema, levando em consideração a característica dos dois átomos de hidrogênio mais próximos e os outros dois mais afastados dos átomos de oxigênio. A entropia configuracional para o gelo da água a baixas temperaturas é dada por:

$$S_R = K_b \ln(\Omega_R) = N K_b \ln\left(\frac{3}{2}\right) \approx 0,81 \text{ Cal/deg.mol} \quad (2.2)$$

onde S_R é a entropia residual, K_b é a constante de Boltzmann, N é o número de moléculas e Ω_R é o número total de configurações. Posteriormente, em 1936 Giauque & Stout [13] determinaram de forma experimental o valor desta mesma entropia residual com o valor de $0,82 \pm 0,05$ Cal/deg.mol. A convergência dos resultados teóricos de Pauling e dos experimentais de Giauque & Stout é bastante evidente, demonstrando a existência da entropia residual no gelo da água a baixas temperaturas.

Essas descobertas sobre o gelo da água e sua entropia residual têm implicações significativas no estudo dos gelos de spin. A regra do gelo, baseada na organização dos átomos de hidrogênio no gelo da água, também é aplicada aos gelos de spin, onde os spins dos átomos obedecem a regras semelhantes.

2.3 Gelos de Spin Naturais

Em 1997, Harris et al. [14] realizaram um estudo sobre um grupo de materiais chamados gelos de spin, que exibem uma analogia magnética ao gelo da água. Esses materiais possuem uma estrutura cristalina tetraédrica, na qual os momentos magnéticos ocupam os vértices compartilhados por dois tetraedros adjacentes. Tais momentos magnéticos estão

sujeitos à uma forte anisotropia na direção que liga os centros dos tetraedros. Conforme pode ser observado na figura (5), fica evidente a semelhança entre essa estrutura e o gelo da água. Deveras, ao imaginarmos setas apontando para fora ou para dentro do átomo de oxigênio quando o átomo de hidrogênio está mais distante ou mais próximo dele, respectivamente, vemos que essas apontariam na mesma direção dos momentos magnéticos dos íons terra-rara que ocupam os vértices dos tetraedros. O estudo mostrou que no estado fundamental desses materiais, dois spins estão apontando para o centro do tetraedro e os outros dois spins estão apontando para fora, seguindo uma analogia direta com a regra do gelo da água. Essa configuração dos spins resulta em uma frustração geométrica, na qual os spins não conseguem satisfazer simultaneamente todas as interações magnéticas de maneira favorável, levando a um estado altamente degenerado. Nos sistemas pirocloros, ocorre uma frustração geométrica devido à orientação dos spins ao longo de uma linha que conecta os vértices do tetraedro ao seu centro, e esses spins interagem de forma ferromagnética. Esses materiais foram denominados "*gelos de spin*" e incluem uma variedade de pirocloros com constituintes como o Disprósio (Dy) e o Hólmio (Ho).

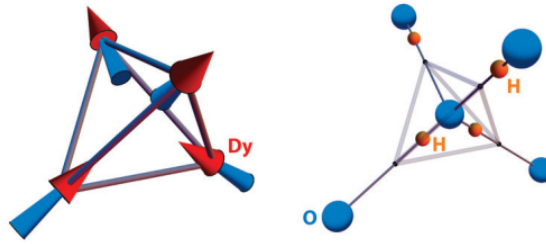


Figura 5 – No gelo da água (direita) um átomo de oxigênio fica centralizado com outros dois átomos de hidrogênio próximos e outros dois mais distantes. Já no gelo de spin (esquerda) os momentos magnéticos estão localizados no vértice do tetraedro com dois deles apontando para o centro e os outros dois para fora. Retirado de: [14]

Estudos realizados em 1999 por Ramirez et al. [15] encontraram uma entropia residual semelhante à do gelo da água nesses materiais. Os íons Ho^{3+} ou Dy^{3+} presentes nesses sistemas possuem momentos magnéticos da ordem de $10\mu_B$ [10]. A hamiltoniana geral que descreve esses sistemas pode ser expressa da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{3} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j + \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \sum_{i < j} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (2.3)$$

os termos dessa equação representam a interação de troca e a interação dipolar. A interação de troca descreve a interação entre os momentos magnéticos dos íons, enquanto a interação dipolar leva em consideração os momentos magnéticos e a distância entre eles.

Em 2012, foi proposta uma modelagem da estrutura pirocloro utilizando halteres com cargas magnéticas opostas no lugar dos momentos magnéticos dos íons terra-rara.

Nessa modelagem, um tetraedro que satisfaz a regra do gelo tem carga total nula em seu interior, enquanto vértices que violam a regra tem uma carga residual. Isso implica na existência de excitações coletivas e pares de cargas opostas, conhecidos como pares monopolo-antimonopolo que podem se propagar pela rede. Essa abordagem permitiu uma compreensão mais profunda da estrutura e das propriedades dos gelos de spin.

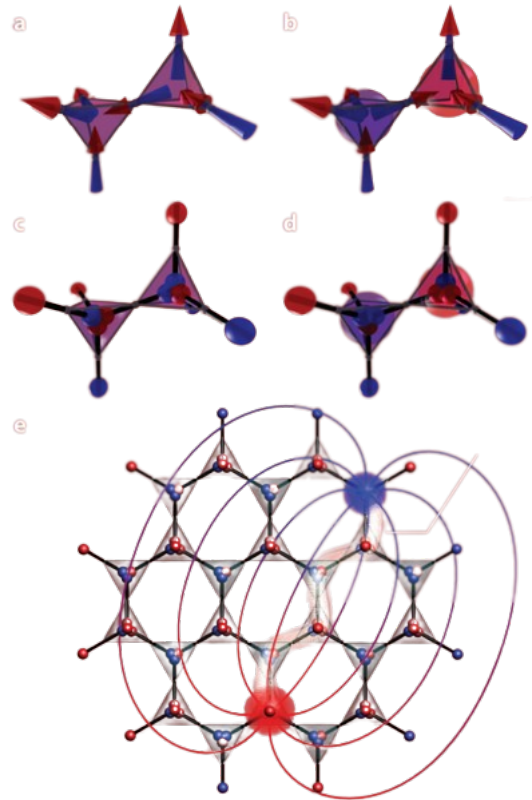


Figura 6 – Montagem do gelo de spin pelo modelo de halteres. (a) Estado fundamental do sistema, em (b) tem-se a inversão do dipolo que conecta os tetraedros (vértice) gerando um par de monopolos magnéticos com cargas contrárias. Nos quadros (c) e (d) representa-se a mesma situação de (b), porém, com a modelagem de halteres. No quadro (e) um par de monopolos magnéticos ligados por uma sucessão de dipolos invertidos. Retirado de: [14]

Os monopolos magnéticos nos gelos de spin podem se afastar, no entanto, permanecem de certa forma conectados por uma estrutura chamada de "*corda de Dirac*", que é uma estrutura não energética composta por uma sequência de tetraedros que satisfazem a regra do gelo por onde os monopolos passaram à medida em que se separavam. É interessante notar que, por ser não energética tal corda não pode ser identificado no sistema. Castelnovo, Moessner e Sondhi [8] mostraram que relacionado à separação entre os monopolos há um potencial magnético de natureza coulombiana, que pode ser expresso matematicamente da seguinte forma:

$$V(r_{\alpha\beta}) = \begin{cases} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Q_\alpha Q_\beta}{r_{\alpha\beta}} & (\alpha \neq \beta) \\ \frac{1}{2} \nu_0 Q_\alpha^2 & (\alpha = \beta) \end{cases} \quad (2.4)$$

nessa equação, Q_α e Q_β representam os valores totais de carga magnética nos centros dos tetraedros, e $r_{\alpha\beta}$ é a distância entre os sítios. O termo $\frac{1}{2}\nu_0$ reproduz o valor das interações entre vizinhos próximos.

Esse comportamento dos gelos de spins naturais constitui a primeira realização do fenômeno de fracionalização em um sistema tridimensional, como mostrado em um estudo realizado por Castelnovo et al. [8] em 2008. Esse artigo descreve um comportamento de monopolo magnético para as excitações primárias nos gelos de spin naturais, onde apenas uma pequena fração dos dipolos está envolvida. Esses monopólos magnéticos são fracionalizados, o que significa que eles carregam apenas uma fração de um dipolo magnético. A figura (7) apresenta uma ilustração desse comportamento fracionalizado dos monopólos magnéticos nos gelos de spin naturais.

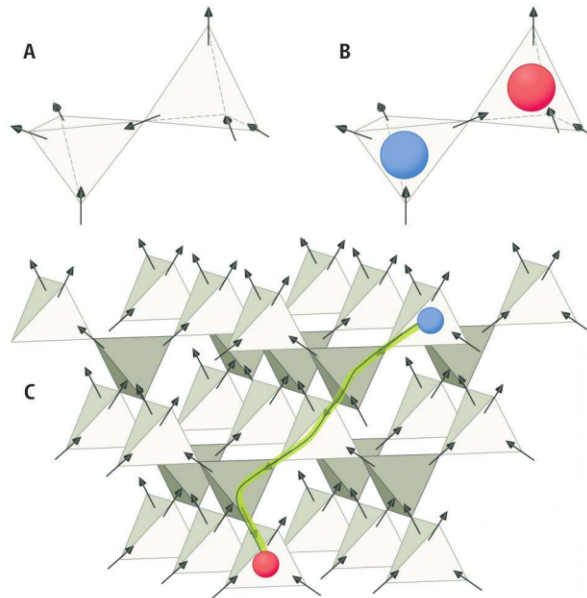


Figura 7 – (A) Representação de tetraedros adjacentes de uma rede pirocloro de gelos de spin em seu estado fundamental. (B) Primeiro estado excitado do sistema, após a inversão dos spins de conexão dos tetraedros, com a aparição de duas excitações no formato de monopolo magnético. (C) Separação dos monopolos magnéticos pela inversão de sucessivos spins, com os tetraedros intermediários mantendo-se no estado fundamental. A conexão de strings é feita pela linha verde (conexão dos monopolos) com o caminho feito pela inversão de spins.

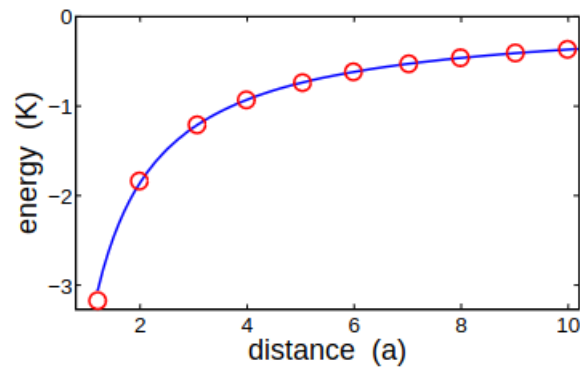


Figura 8 – Comparação entre a energia magnética de Coulomb com o cálculo da energia dos gelos de spin (círculos vermelhos). A configuração está em função da separação de monopólos. Retirado de: [8]

2.4 Gelos de Spin Artificial - GSA

De fato, a observação dos monopólos magnéticos não se limita apenas a sistemas tridimensionais, mas também foi verificada em sistemas bidimensionais. Um estudo realizado por Wang et al. [16] investigou uma rede quadrada de nano-ilhas de permalloy com distâncias variáveis entre os centros das nano-ilhas. As dimensões das nano-ilhas eram fixas em $25\text{nm} \times 220\text{nm} \times 80\text{nm}$, enquanto as distâncias entre elas variavam na escala de 320nm a 880nm.

Nesse sistema, os momentos magnéticos das nano-ilhas produzem uma magnetização que pode ter dois sentidos possíveis, mas restrita à direção do eixo mais longo das nano-ilhas. No artigo mencionado, também foi realizado um estudo sobre os vértices presentes na rede e suas configurações, levando em consideração a energia associada a cada configuração (tipo I, tipo II, tipo III e tipo IV). De acordo com os resultados apresentados por Wang, a proporção de vértices de cada tipo está relacionada com o espaçamento entre as nano-ilhas na rede. Com um espaçamento menor, aproximadamente 70% dos vértices obedecem à regra do gelo, um valor maior do que o esperado inicialmente. No entanto, foi observado que essa porcentagem diminui monotonicamente com o aumento do espaçamento entre as nano-ilhas, alcançando valores semelhantes aos de uma distribuição aleatória de momentos magnéticos para grandes espaçamentos.

O estudo realizado por Tanaka et al. [17] apresentou um sistema de nanofios magnéticos organizados em uma rede hexagonal chamada de "*Honeycomb*" (hexagonal). Nesse sistema, os spins estão alinhados ao longo das arestas da geometria hexagonal. Cada vértice da rede possui três spins, o que impede a neutralidade de carga magnética ². No entanto, a regra do gelo é respeitada e a energia do sistema é minimizada.

² O valor da carga magnética é fixado em $Q = \pm 1$. De forma que, a regra do gelo é respeitada e a energia é minimizada.

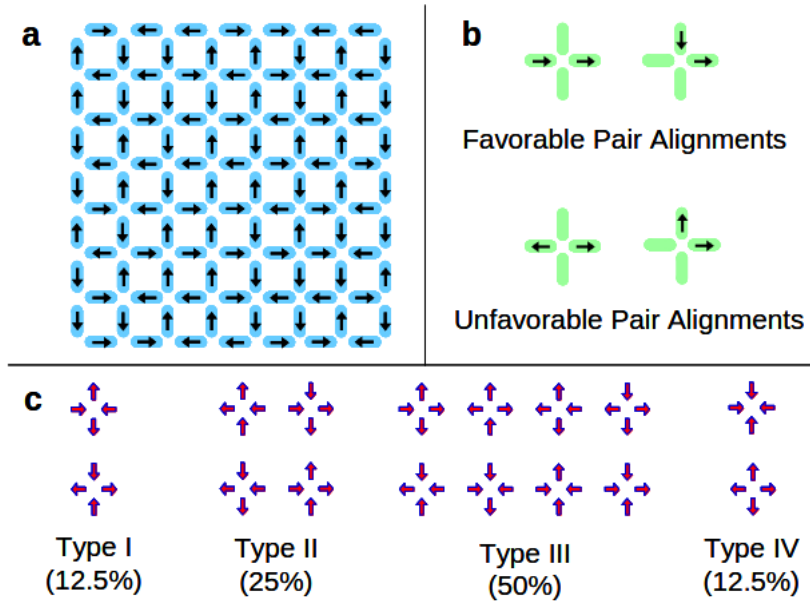


Figura 9 – (a) Geometria do GSA na rede quadrada. Com as setas representando os momentos magnéticos. (b) Interação entre os pares de spin. A interação dipolar define a posição com valor de energia favorecida e desfavorecida. (c) Classificação dos tipos de vértice em ordem crescente de energia. A porcentagem indica a recorrência de cada tipo de vértice, com os momentos magnéticos orientados aleatoriamente. Retirado de: [16]

Similar ao trabalho de Castelnovo et al. [8], Mól et al. [18] propuseram um estudo sobre as excitações acima do estado fundamental em uma rede bidimensional quadrada. Nesse sistema, as nano-ilhas magnéticas exibem um comportamento de paridade de monopólos magnéticos, que surgem devido à violação da regra do gelo. Um aspecto importante abordado pelo trabalho de Mól é a obtenção do potencial de interação entre pares de monopólos em função de sua distância. Esse potencial descreve a interação entre os monopólos magnéticos e é um elemento fundamental para entender as propriedades e o comportamento das excitações nesse sistema magnético.

A equação proposta por Mól et al. [18] para descrever o potencial de interação entre as excitações que violam a regra do gelo em função da distância é dada por:

$$V(r) = \frac{a}{R} + b \cdot X(R) + C \quad (2.5)$$

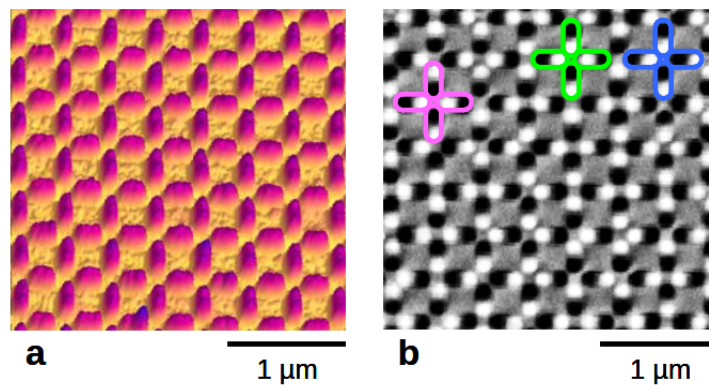


Figura 10 – Imagem de MFM (b) as regiões em azul e rosa mostra as estruturas que obedecem a regra do gelo. A região demarcada em amarelo mostra uma estrutura onde a regra do gelo não é obedecida. A figura (a) é gerada por AFM. Retirado de: [16]

o primeiro termo representa a interação de caráter Coulombiano, que está associado ao comportamento monopolar das excitações. Esse termo descreve a interação entre os monopólos magnéticos e segue a lei de Coulomb, onde a energia diminui à medida que a distância entre os monopólos aumenta. O segundo termo está relacionado a uma energia em forma de "string" que conecta as cargas. A função $X(R)$ descreve o comprimento deste "string" e é proporcional à distância R entre as excitações. Assim, a "string" será mais energética quanto mais distantes estiverem as excitações. Isso significa que a separação por uma grande distância entre as excitações será desfavorecida, resultando em um aumento da energia do sistema. O termo C é uma constante que representa uma contribuição adicional para a energia de interação entre os spins, mas não está relacionado diretamente com a distância entre eles. Tais características são mais semelhantes à teoria de Nambu dos monopólos magnéticos que prevê a existência de um string energético conectando os monopólos. Por ser energético, tal string é observável e pelo fato de sua energia aumentar proporcionalmente ao comprimento do string, o potencial confina os monopólos.

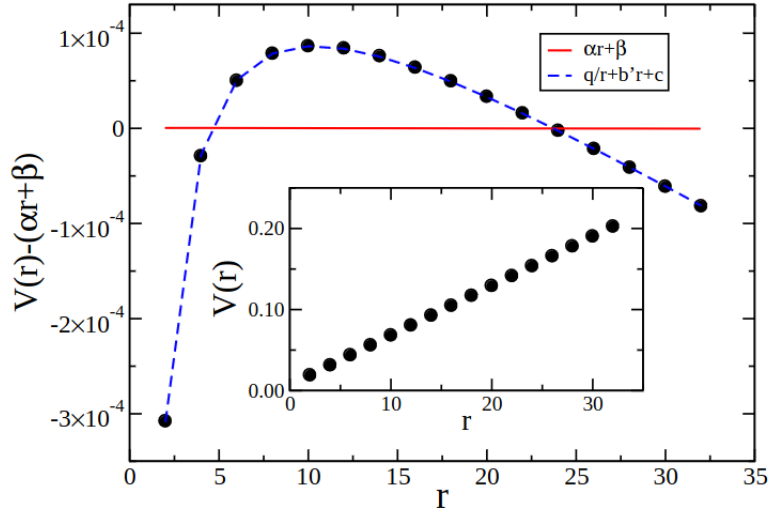


Figura 11 – O gráfico $V(r) \times r$ apresenta o potencial de interação com cargas de sinais opostas em relação a sua distância. O gráfico $[V(r) - (\alpha r + \beta)] \times r$, expõe um ajuste da curva linear menos a diferença do potencial anterior. Retirado de: [18]

A figura (12), gerada a partir do algoritmo "fieldcalc(1).f90", ilustra as linhas de campo magnético dos monopolos num gelo de spin artificial na rede quadrada. Esse algoritmo realiza o cálculo das linhas de campo com base em determinados parâmetros:

1. Calcula-se o campo magnético \vec{B} no estado fundamental \vec{B}_0 .
2. Calcula-se o campo magnético após induzir excitações \vec{B}_e .
3. Calcula-se o campo magnético apenas com as excitações no sistema, de maneira que:

$$\vec{B}_{exc} = \vec{B}_e - \vec{B}_0 \quad (2.6)$$

Em continuidade aos estudos da rede quadrada, Möller & Moessner [19] propuseram um modelo no qual as ilhas horizontais são deslocadas verticalmente em relação às ilhas verticais, utilizando um parâmetro de diferença de altura h . Esse deslocamento permite que, para um valor específico de h , os spins de um vértice qualquer estejam equidistantes de seus vizinhos. No entanto, as energias associadas a esses vértices são muito próximas, resultando na degenerescência entre os tipos de vértices I e II. Considerando dipolos pontuais, o parâmetro h foi aproximadamente $0.419a^3$.

Com relação à temperatura, foi observado que, em uma ampla faixa de valores, os vértices respeitam a regra do gelo e ocorrem com a mesma probabilidade. Essa característica

³ O valor de a representa o parâmetro de rede, ou seja, a distância entre vértices vizinhos. É importante notar que, nesse contexto, considerou-se apenas a interação entre primeiros e segundos vizinhos.

é resultado do deslocamento vertical proposto por Möller & Moessner [19], levando o sistema a um verdadeiro estado de gelo. No entanto, em temperaturas mais baixas, o sistema entra em uma fase totalmente ordenada.

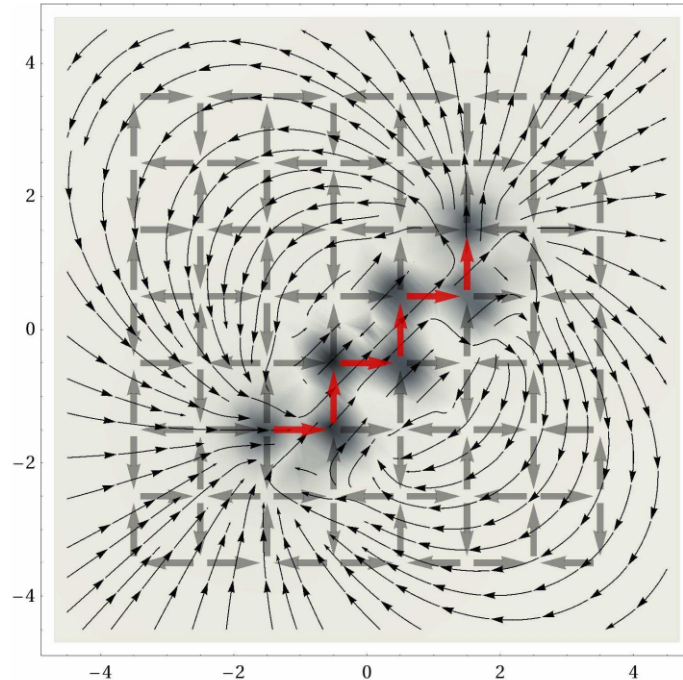


Figura 12 – Linhas de campo magnético e sua intensidade sob excitações do estado fundamental da rede quadrada. Observe que os spins pintados de vermelho representam as excitações, pois, foram invertidos. Outra observação é dada pelo comportamento monopolar que reproduz a interação de cargas de sinal oposto, com comportamento linear ao rumo do caminho onde fora invertido os spins. Retirado de: [20]

Em seu trabalho, Mól et al. [21] considerou todas as interações dipolares e obteve um valor de aproximadamente $0.444a$ para o valor de h que leva à degenerescência entre os vértices do tipo I e II. Isso resultou na estabilização da fase de gelo, levando em conta os primeiros e segundos vizinhos do sistema.

Embora tenha sido enfatizada a rede quadrada, é importante destacar a riqueza de propriedades e comportamentos encontrados no gelo de spin em diferentes geometrias. Entre essas geometrias, a rede triangular [22] se destaca. Nesse trabalho, foram mostradas as excitações do tipo monopolo e a ocorrência de uma transição de fase com características da classe de Ising.

Além da rede quadrada e triangular, existem outras redes que também foram estudadas no contexto do gelo de spin. Dentre uma infinidade de estudos, destacamos os seguintes:

- Rede Honeycomb: Essa rede, composta por hexágonos regulares interligados, foi estudada por Ladak et al. [23]. Eles investigaram as propriedades magnéticas do gelo

de spin em uma rede Honeycomb bidimensional, revelando características únicas desse sistema.

- Rede Brickwork: A rede Brickwork, constituída por unidades retangulares interligadas, foi abordada por Li et al. [24]. Eles realizaram comparações entre o gelo de spin em redes quadradas e redes Brickwork, explorando as diferenças de comportamento e propriedades emergentes.
- Rede Staggered Shakti: A rede Staggered Shakti, proposta por Morrison et al. [25], é uma variante do gelo de spin em redes triangulares com um padrão de frustração adicional. Eles investigaram as propriedades dessa rede, incluindo a formação de domínios magnéticos e a presença de excitons magnéticos.

Esses estudos em diferentes redes contribuem para a compreensão mais abrangente do gelo de spin, revelando as propriedades específicas de cada geometria e enriquecendo nossa compreensão do fenômeno da frustração geométrica. A figura (13) mostra um compilado de estruturas que foram estudadas.

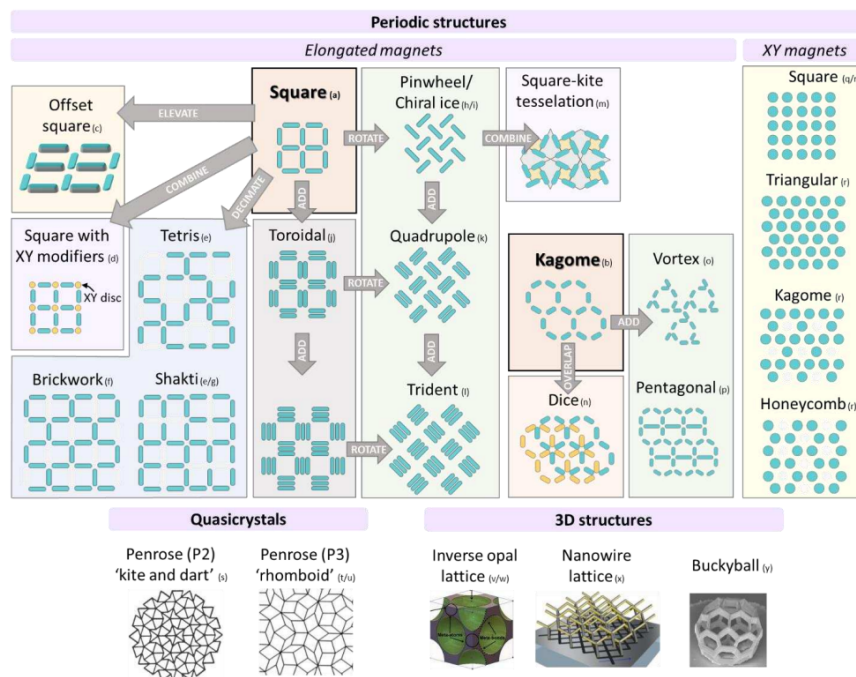


Figura 13 – Família de sistemas de gelo spin. Fica notória as conexões entre diferentes tipos de rede que já foram construídas de forma experimental e teórica. Existem classes de sistemas que não se encontram expostos na imagem, porém, possuem pontos magnéticos fora do plano de magnetização e, são modelados computacionalmente pelos sistemas XY. Para as redes quasicristais (interesse deste trabalho) tem-se os sistemas \mathcal{P}_2 e \mathcal{P}_3 embora, estudos atuais usem compostos individuais para investigação de propriedades. Retirado de: [26]

2.5 Transição de Fase em GSA's

Outra propriedade importante dos GSA's que tem sido amplamente estudada é o seu comportamento termodinâmico. Devido ao espaçamento entre as nano ilhas e sua composição, esses materiais apresentam uma barreira energética que impede a inversão do momento magnético de cada ilha em uma faixa de temperatura de aproximadamente 10^4 a 10^5 K. No entanto, alcançar o estado fundamental desses sistemas tem sido um desafio, uma vez que, aquecer a amostra é necessário para que ela seja termalizada. No entanto, ao aquecer o sistema, atinge-se temperaturas maiores do que as suportadas pelo material.

As primeiras tentativas de atingir o estado fundamental foram realizadas por Wang [27], por meio de um protocolo de desmagnetização. Nesse protocolo, a amostra é submetida a um campo magnético externo que diminui ao longo do tempo, enquanto a amostra é rotacionada. No entanto, mesmo com esse protocolo, não foi possível atingir o estado fundamental.

A partir desse protocolo, surgiu o estudo de uma termodinâmica efetiva para GSA's, relacionada a uma temperatura efetiva que depende do campo magnético aplicado na amostra. Outras abordagens foram propostas, como a de Morgan et al. [28], que submete a amostra a um tratamento térmico de recozimento (*annealing*). Com a redução do volume das nano ilhas, a energia da barreira de inversão diminui, facilitando a termalização do sistema.

Simulações de Monte Carlo para o GSA na rede quadrada [29] revelaram um pico na curva de calor específico em uma temperatura $T_t \approx 7.2D/K_b$, em que D é uma constante que representa a força das interações dipolares e K_b é a constante de Boltzmann. Observou-se também que o valor máximo do calor específico e a separação máxima entre os monopolos divergem de forma logarítmica com o tamanho da rede. No limite termodinâmico, espera-se que os monopolos estejam infinitamente separados de seus opostos caracterizando uma transição de fase entre uma fase ordenada de baixa temperatura e uma fase desordenada de alta temperatura mediada pelo desligamento dos pares monopolo - anti-monopolo.

Redes GSA's também podem apresentar transições de fase com frustração de vértices [30]. A configuração e disposição dos vértices na rede fazem com que apenas uma minoria deles minimize simultaneamente sua energia. Isso resulta em uma grande variedade de microestados, que podem ser encontrados no estado fundamental e se comportam de maneira análoga ao gelo de spin.

Esses estudos sobre o comportamento termodinâmico dos GSA's são essenciais para entender melhor suas propriedades e aplicações, além de fornecer insights valiosos sobre fenômenos como a termalização, transições de fase e comportamento coletivo dos monopolos magnéticos.

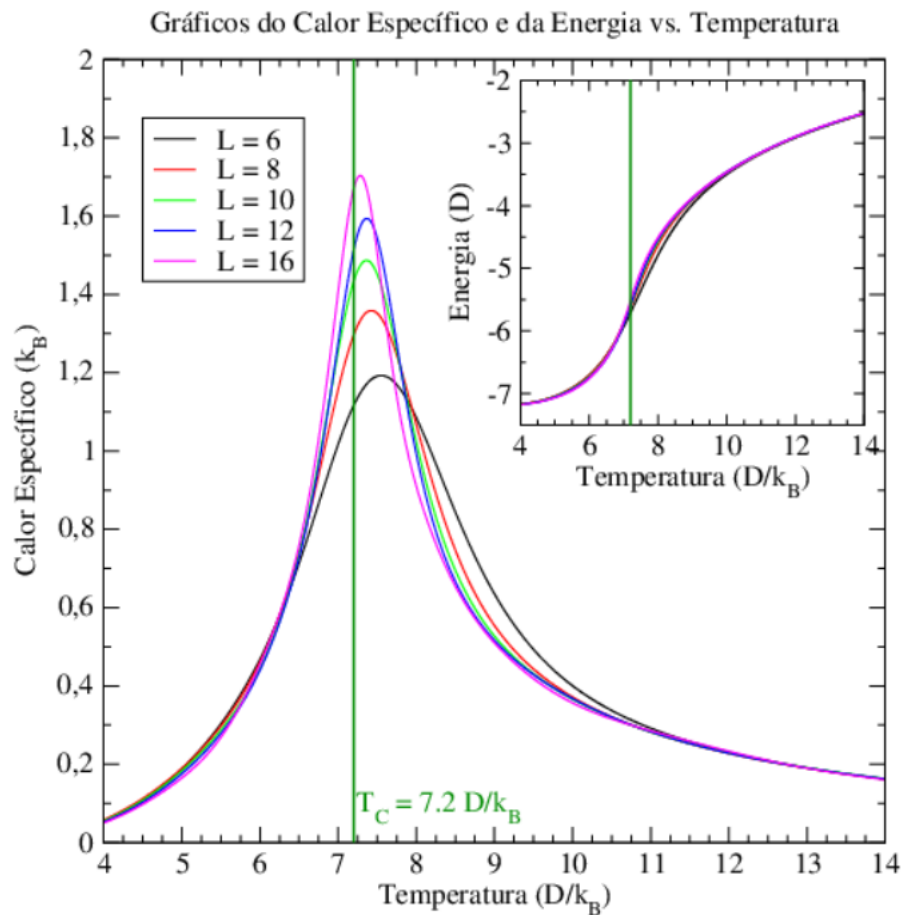


Figura 14 – Demarcação da temperatura estimada para a ocorrência da transição de fase da rede quadrada via algoritmo de Wang-Landau. Retirado de: [31]

2.6 Interações Magnéticas

No estudo dos fenômenos magnéticos, são consideradas as interações fundamentais: a interação de troca, a interação dipolar, anisotropia de forma e magnetocristalina.

- A interação de troca é uma interação de curto alcance que ocorre entre spins magnéticos adjacentes. Ela surge devido à sobreposição dos orbitais eletrônicos e está relacionada à tendência dos spins de alinharem paralelamente ou antiparalelamente. A interação de troca é responsável por fenômenos como a ordenação magnética e o comportamento coletivo dos spins em materiais magnéticos.
- A interação dipolar é uma interação de longo alcance que ocorre entre momentos magnéticos, como dipolos magnéticos ou nanopartículas magnéticas. Essa interação é regida pelas leis do eletromagnetismo e depende da distância e orientação relativa entre os momentos magnéticos. A interação dipolar desempenha um papel crucial em materiais magnéticos, influenciando a organização espacial dos momentos magnéticos

e contribuindo para a estabilidade de estruturas magnéticas, como as observadas nos GSA's.

- A anisotropia de forma é uma interação relacionada à preferência dos momentos magnéticos se alinharem ao longo de direções específicas determinadas pela geometria do material. A anisotropia de forma pode ser influenciada por fatores como a forma das partículas magnéticas, sua orientação e a presença de campos magnéticos externos. Essa interação desempenha um papel importante na determinação das propriedades magnéticas dos materiais, como a direção preferencial de magnetização e a estabilidade dos domínios magnéticos. A origem desta contribuição está, também, no eletromagnetismo clássico e é o resultado das interações entre todos os momentos magnéticos que compõe uma nanopartícula.
- A anisotropia magnetocristalina ocorre devido ao acoplamento spin-órbita, o qual induz uma direção preferencial aos spins dos elétrons em um material. Esse acoplamento surge devido à interação entre o spin do elétron e o seu movimento orbital. Como resultado, a anisotropia magnetocristalina influencia a orientação dos spins e tende a alinhá-los em uma mesma direção. A dependência da anisotropia magnetocristalina em relação à posição do elétron na estrutura cristalográfica do material é crucial. A estrutura cristalina define as direções preferenciais para a magnetização, conhecidas como "*eixos-fáceis*" de magnetização. Esses eixos correspondem às direções ao longo das quais a energia associada à anisotropia é minimizada.

2.6.1 Interação de Troca

Em grande parte dos sistemas magnéticos a interação de troca está presente. A interação de troca é descrita pelo hamiltoniano de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \mathcal{J}_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.7)$$

com \mathcal{J}_{ij} a constante de troca dos spins localizados na posição i e j , o somatório é feito somente sobre os primeiros vizinhos.

A origem do Hamiltoniano de Heisenberg está intrinsecamente ligada à sobreposição de funções de onda para partículas indistinguíveis, resultando em uma repulsão entre férmions e uma tendência de aglomeração entre bósons. Essa repulsão está diretamente relacionada ao princípio de exclusão de Pauli. A concepção de uma sobreposição, ou "*overlap*", implica que a interação de troca seja de curto alcance, limitada a distâncias da ordem de ângströms.

2.6.2 Interação Dipolar

Os estudos dessa dissertação foram desenvolvidos a partir da interação dipolar. A interação dipolar advém da interação de dipolos magnéticos do sistema, com origem magnética. O vetor $\vec{\mu}_j$ representa um momento de dipolo magnético em uma posição \vec{r}_j . Portanto, calculando o campo magnético gerado por este dipolo em uma posição \vec{r}_i vide [32] [33]:

$$\vec{B}(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [3(\vec{\mu}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij} - \vec{\mu}_j] \quad (2.8)$$

μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo e $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ que representa o vetor posição que liga o dipolo na posição \vec{r}_j com o localizado em \vec{r}_i . Fazendo uma troca do dipolo $\vec{\mu}_j$ para um conjunto de dipolos $\vec{\mu}_j$ com suas localizações em \vec{r}_j para $j = 1, 2, 3$ e assim por diante, fica-se com:

$$\vec{B}(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{j=1} \frac{1}{r_{ij}^3} [3(\vec{\mu}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij} - \vec{\mu}_j] \quad (2.9)$$

a expressão (2.9) faz menção ao campo magnético em uma posição \vec{r}_i para uma distribuição arbitrária de dipolos magnéticos. Como também interessa saber o valor de energia ⁴ para uma distribuição de spins no espaço, faz-se o cálculo para tal. A energia de um dipolo na presença de um campo magnético [32] [33] é dada por:

$$E = -\mu_j \cdot \vec{B} \quad (2.10)$$

utilizando a equação (2.9) e acoplando um dipolo $\vec{\mu}_i$ na posição \vec{r}_i pode-se obter a energia pela presença deste dipolo no campo gerado pelos outros como sendo:

$$E_{dipolar}^{(i)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \vec{\mu}_i \cdot \sum_{j=1} \frac{1}{r_{ij}^3} [3(\vec{\mu}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij} - \vec{\mu}_j] \quad (2.11)$$

a energia de toda distribuição será dada pela soma de todos os spins do sistema e dividido por dois, para agir como uma restrição para os valores $j > i$. A distribuição final de dipolos magnéticos será dada por:

$$E_{dipolar} = \sum_i E_{dipolar}^{(i)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{j>i} \frac{1}{r_{ij}^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij} - \vec{\mu}_j] \quad (2.12)$$

No caso da rede de Penrose, em que os comprimentos são tratados na escala nanométrica, a interação de troca entre os spins magnéticos pode ser desprezada devido ao seu curto alcance. Nesse contexto, a interação dipolar se torna a interação dominante. Ela

⁴ A energia é minimizada quando os spins possuem alinhamento antiparalelo.

influencia a organização espacial dos momentos magnéticos nas nano ilhas e determina as propriedades magnéticas da rede. Ela é, ainda, responsável pela formação de configurações magnéticas complexas e pode levar ao surgimento de padrões de frustração geométrica, como os observados nos GSA's.

2.6.3 Anisotropia de Forma

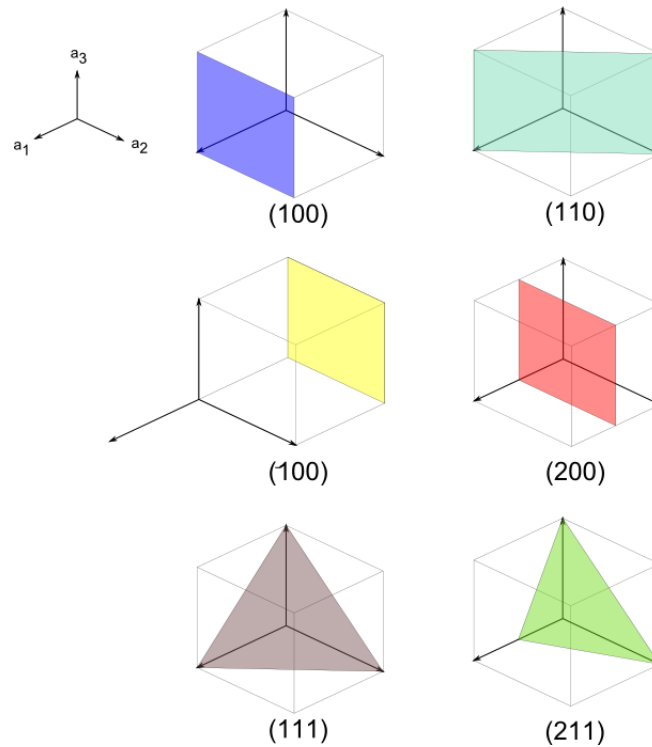


Figura 15 – Estruturas Cúbicas de face centrada, na figura é possível ver alguns configurações gerais: Eixo Fácil [111], Eixo Difícil [100], Eixo Médio [110]. Retirado de: https://pt.wikipedia.org/wiki/Índice_de_Miller.

O campo de desmagnetização (\vec{H}_d) é um campo magnético interno que surge em materiais magnéticos devido à presença de polos magnéticos na superfície do material. Esses polos são resultado da distribuição desigual de momentos magnéticos dentro do material. Fazendo uso das equações de Maxwell na forma local, pode-se traduzir o significado do campo \vec{H}_d .

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}_d = 0 \quad (2.13)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.14)$$

Sabe-se que o resultado da equação (2.14) pode ser representado na forma de um potencial escalar ϕ , de maneira que:

$$\vec{H}_d = -\vec{\nabla}\phi \quad (2.15)$$

fazendo uso da relação do eletromagnetismo [32] [33] $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$ na expressão (2.14), chega-se em:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M} \quad (2.16)$$

substituindo (2.15) em (2.16):

$$\vec{\nabla}^2 \phi_{int} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M} \quad (2.17)$$

comparando (2.17) com a equação de Poisson para o caso eletrostático, tem-se de forma direta que as soluções podem ser obtidas em termos de densidades de cargas volumétrica e superficial, conforme explorado abaixo:

$$\rho_M = \vec{\nabla} \cdot \vec{M} \quad (2.18)$$

$$\phi_{int} = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (2.19)$$

onde ρ_M é a densidade volumétrica de carga e a integral é realizada no volume da fonte, \vec{r}' corresponde a posição de um pedaço infinitesimal do volume da fonte, enquanto, \vec{r} é a posição onde se pretende calcular o potencial. Como na região externa do material $\vec{M} = 0$ segue de (2.17) para o potencial externo:

$$\vec{\nabla}^2 \phi_{ext} = 0 \quad (2.20)$$

a densidade superficial (σ_M) é obtida via (2.18). Fazendo uso do teorema da divergência a densidade superficial de cargas será:

$$\sigma_M = \vec{M} \cdot \hat{n} \quad (2.21)$$

como se considera a finitude do sistema magnético, o potencial mais geral considerando as condições de contorno da superfície gera a seguinte expressão:

$$\phi_{int} = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' + \frac{1}{4\pi} \int_S \frac{\hat{n}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \quad (2.22)$$

a energia magnetostática é dada pela expressão [32] [33]:

$$E_{mag} = \frac{1}{2} \int \mu_0 \vec{M} \vec{H}_d d^3 r \quad (2.23)$$

no cálculo do campo de desmagnetização \vec{H}_d , é possível utilizar a equação (2.22) acoplada à equação (2.15). A energia magnetostática será mínima quando $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ e $\hat{n} \cdot \vec{M} = 0$,

onde $\vec{\nabla}$ representa o operador nabla, \vec{M} é o vetor de magnetização e \hat{n} é um vetor normal à superfície do material. Portanto, ao acoplar a equação (2.22) em (2.15) e considerar as condições de $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ e $\hat{n} \cdot \vec{M} = 0$, é possível calcular o campo de desmagnetização \vec{H}_d e obter informações sobre a distribuição de energia magnética no sistema. Essa abordagem é especialmente útil em sistemas magnéticos bidimensionais e alongados, onde as propriedades do campo de desmagnetização desempenham um papel significativo. O trabalho citado [34] aborda essas condições e a importância do alinhamento dos momentos magnéticos para a minimização da energia magnetostática em sistemas alongados e bidimensionais.

3 Métodos de Simulação

Eu sou pessoa

A palavra pessoa hoje não soa
bem

Pouco me importa

Conheço meu Lugar - Belchior

Neste capítulo, serão apresentados os métodos computacionais utilizados para investigar o sistema em estudo e obter informações teóricas relevantes. Esses métodos são fundamentais para compreender as características do sistema e estabelecer a relação entre as grandezas termodinâmicas e a temperatura. Para isso, serão aplicadas ferramentas da mecânica estatística, que permitem analisar o comportamento estatístico dos sistemas em equilíbrio.

Os métodos computacionais [35] & [36] desempenham um papel crucial na simulação e análise de sistemas complexos, permitindo realizar cálculos e obter resultados numéricos que auxiliam na compreensão dos fenômenos estudados. A mecânica estatística, por sua vez, fornece um arcabouço teórico para descrever o comportamento estatístico de um sistema a partir das interações entre suas partículas constituintes. Isso permite compreender a natureza das transições de fase, as propriedades críticas e outras características relevantes do sistema em estudo.

3.1 Método de Monte Carlo

A utilização de números aleatórios para a simulação de problemas é uma prática que remonta ao século passado. O método de Monte Carlo, inicialmente desenvolvido por físicos e matemáticos renomados, como Enrico Fermi, Stanislaw Ulam, John von Neumann, Edward Teller e Nicholas Metropolis, ganhou destaque em aplicações na física e na química, incluindo o estudo de processos termonucleares no Projeto Manhattan. O sucesso do método nessas áreas impulsionou sua adoção em diversos outros campos científicos, e sua relevância perdura até os dias de hoje.

Na Mecânica Estatística, a propriedade termodinâmica de um sistema é determinada por meio da média sobre o conjunto de estados microscópicos, com a escolha do conjunto correlacionada às condições de contorno do problema. Para o tipo de sistema que estamos interessados neste trabalho, é interessante considerarmos o ensemble canônico, com temperatura (T), volume (V) e número de partículas (N) fixos. A média sobre o ensemble é obtida por meio de uma soma (ou integral no caso de estados que variam

continuamente) sobre todos os microestados acessíveis ao sistema. A expressão geral é dada por:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\sum_n \mathcal{A}(x^n) \exp(-\mathcal{H}/K_b T)}{\sum_n \exp(-\mathcal{H}/K_b T)} \quad (3.1)$$

onde $\mathcal{A}(x^n)$ é o valor que a grandeza \mathcal{A} assume na configuração x^n e \mathcal{H} é a energia dessa configuração a média é realizada no espaço de fase, a ponderação é dada por $\exp(-\mathcal{H}/K_b T)$ refletindo a probabilidade de que o sistema esteja em um estado particular, de acordo com a distribuição de *Boltzmann*.

O método de Monte Carlo resolve um desafio enfrentado na física da matéria condensada, em que sistemas possuem um grande número de microestados. Em vez de acessar diretamente todos os microestados existentes, o que seria impraticável, o método permite acessar estados que respeitam o peso de Boltzmann por meio de processos Markovianos. Para obter uma boa amostragem, é necessário garantir que esses estados sejam adequadamente amostrados.

No entanto, o procedimento do método de Monte Carlo não é único, sendo necessário utilizar um protocolo de seleção adequado. Um dos algoritmos mais conhecidos é o Algoritmo de Metropolis [37], que será utilizado neste trabalho.

3.1.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de seleção proposto por Metropolis é conhecido como "*importance sampling*" ou amostragem por importância. Ele permite a seleção de um grande número de configurações, que seguem a distribuição de probabilidades desejada. No algoritmo, calcula-se a taxa de transição de uma configuração ν para uma configuração ν' por meio de um processo probabilístico chamado processo de Markov [38]. O processo de Markov é uma construção de trajetória de pontos $\{x_n\}$ através do espaço de fase do sistema.

As taxas de transição para se recuperar a distribuição de Boltzmann, que é a distribuição de probabilidades esperada no ensemble canônico, podem ser obtidas ao considerar a condição de balanço detalhado [35] levando à seguinte condição:

$$\frac{\mathcal{W}(x_\nu^N \rightarrow x_{\nu'}^N)}{\mathcal{W}(x_{\nu'}^N \rightarrow x_\nu^N)} = \frac{\mathcal{P}(x_{\nu'}^N)}{\mathcal{P}(x_\nu^N)} = \exp\left(\frac{-\Delta\mathcal{H}}{K_b T}\right) \quad (3.2)$$

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(x_{\nu'}^N) - \mathcal{H}(x_\nu^N) \quad (3.3)$$

logo a probabilidade de transição depende da diferença de energia entre as configurações ν e ν' . Da expressão (3.3) obtém-se a nova configuração, com os seguintes aspectos:

1. Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, a energia é dita favorável e o algoritmo de *Metropolis* aceita as alterações.

2. Caso contrário, um número aleatório " p " no intervalo $[0, 1]$ é sorteado e equiparado ao fator de *Boltzmann*. As alterações são aceitas se $p < \exp\left(\frac{-\Delta\mathcal{H}}{K_bT}\right)$.

se nenhuma das condições acima for satisfeita, a configuração anterior é mantida e o cálculo das médias é realizado novamente. Esse processo é repetido, resultando em uma cadeia de configurações que compartilham o peso de *Boltzmann*. As médias termodinâmicas do sistema são determinadas a partir das médias aritméticas:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^M \mathcal{A}(x_{\nu}^N) \quad (3.4)$$

com $\mathcal{A}(x_{\nu}^N)$ o valor da propriedade que se pretende calcular, após ν -ésimos aplicações do algoritmo. Condensando o processo do algoritmo de Metropolis, seguem-se os seguintes passos:

1. Especificar uma configuração inicial x_{ν}^N para o sistema;
2. Gerar uma nova configuração aleatória x'_{ν}^N ;
3. Calcular a mudança de energia $\Delta\mathcal{H}$;
4. Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, aceita a configuração e retorna para o passo 2;
5. Se $\Delta\mathcal{H} > 0$, gerar um número aleatório $p \in [0, 1]$;
6. Se $p < \exp\left(\frac{-\Delta\mathcal{H}}{K_bT}\right)$, aceita a nova configuração e retorna ao passo 2;
7. Caso contrário, utilizar a configuração anterior como nova configuração e retornar ao passo 2;

seguido sucessivamente o algoritmo, pode-se armazenar propriedades termodinâmicas como a energia e magnetização dado a acessibilidade do estado. Posteriormente calculam-se as médias termodinâmicas através de médias aritméticas dentre o conjunto de estados gerados.

É importante garantir um bom gerador de números aleatórios para evitar viés nos dados e erros no algoritmo. Além disso, o algoritmo de Metropolis pode enfrentar problemas de ergodicidade em algumas situações, dentre elas em sistemas de alta temperatura, onde todas as inversões de spin são aceitas. Uma solução para esse problema é usar uma taxa de transição modificada que respeite o balanceamento detalhado e a ergodicidade como a dinâmica de Glauber [39]. Em outras situações sujeitas a problemas de ergodicidade, outros métodos devem ser usados, como delineado abaixo.

No método de Monte Carlo, um passo de Monte Carlo (MCS) consiste na repetição

do procedimento descrito acima um certo número de vezes (N), correspondendo ao número de spins na rede.

Após o equilíbrio do sistema em cada temperatura, um novo conjunto de médias é gerado, como mostrado na equação (3.4). Por fim, associa-se a essas médias seus respectivos erros estatísticos, calculados usando a equação:

$$\Delta\mathcal{A} = \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{n}} \quad (3.5)$$

onde $\Delta\mathcal{A}$ representa o erro na estimativa da média $\langle A \rangle$ e, n é o número de valores usados para calcular as médias. Esse cálculo do erro permite avaliar a incerteza associada à estimativa da média e fornecer uma medida da confiabilidade dos resultados obtidos.

3.1.2 O Princípio de Worm

O algoritmo de loop, também conhecido como algoritmo de *Worm*, foi introduzido no trabalho de Melko & Gingras [40] para resolver problemas de amostragem que surgem na simulação de gelos de spin naturais. Na fase de baixas temperaturas deste sistema encontramos duas fases distintas, uma que obedece localmente a regra do gelo em todos os tetraedros e outra onde há um ordenamento de longo alcance que respeita a regra do gelo. O ponto importante é que a probabilidade de obter esse ordenamento de longo alcance usando apenas mudanças locais no sistema é ínfima. Isso quebra a hipótese de ergodicidade, uma vez que a probabilidade de acessar estes estados ordenados seria efetivamente nula. Para contornar o problema propôs-se a utilização de *Worms*. Esse método funciona criando loops aleatórios no sistema através de inversões realizadas com o argumento do algoritmo de Metropolis. A probabilidade de aceitar um loop depende da diferença de energia entre os dois estados do loop. Se a configuração levar o sistema a um estado de menor energia, o loop é automaticamente aceito. No entanto, se a configuração levar o sistema a um estado de maior energia, a aceitação é determinada por um peso $\Delta\mathcal{H}$ dado por $\exp\left(\frac{-\Delta\mathcal{H}}{K_b T}\right) > p$, onde o número aleatório possui uma distribuição uniforme entre 0 e 1.

A proposta dos loops é baseada na conservação do fluxo local [41], ela mantém localmente a obediência da regra do gelo enquanto permite mudanças não locais na configuração do sistema, acessando uma faixa de energias que não seria acessível de outras formas, ou seja, ao fechar o caminho é garantido que não mexemos no número de spins para dentro ou para fora e, conseqüentemente na regra do gelo. Por exemplo, em uma configuração "two in - two out", existem duas possibilidades para a saída em um tetraedro, o que garante a formação de loops. Ao percorrer o sistema com loops (in-out-in-out-in-out...), acaba-se fechando um caminho ou ciclo que mantém a regra do gelo e define o próximo microestado.

Existem duas especificações para o tipo de loop:

1. Loop longo: O processo se inicia ao se escolher aleatoriamente um dado vértice da rede e escolhe-se um dos spins que aponta para fora deste vértice. Esse spin se conecta a outro vértice e neste novo vértice escolhe-se novamente um dos spins que aponta para fora dele. O processo é repetido até que esse "Worm" retorne ao vértice escolhido no início do processo. Desta forma, garante-se a formação de um caminho fechado que não altera o número de spins apontando para dentro e para fora dos vértices que são visitados, mantendo a obediência à regra do gelo. Ao final do processo, propõem-se a modificação no sentido de todos os spins pelos quais o *Worm* passou, aceitando ou rejeitando essa mudança de acordo com a prescrição de Metropolis.
2. Loop curto: O Loop curto segue a mesma ideia de construção do loop longo, porém, ao invés de finalizar o caminho apenas quando o vértice inicial é visitado novamente, o processo é finalizado quando qualquer vértice é visitado novamente. Para garantirmos que não estamos alterando o número de spins apontando para dentro e para fora de cada vértice, a porção inicial do caminho não é modificada, conforme ilustrado na figura (16).

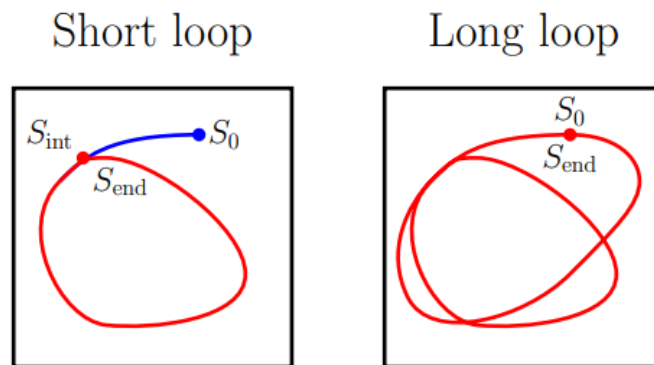


Figura 16 – O loop curto inicia em S_0 e alcança um ponto intermédio S_{int} e se fecha. A parte vermelha é invertida e a parte azul é inalterada. No loop longo não tem-se o fechamento em um S_{int} , mas, apenas no spin inicial S_0 . Retirado de: [41]

Entre essas duas especificações, a de loops curtos possui menor custo computacional e requer menos varredura do espaço de fase. O algoritmo de *Worm* tem sido bem sucedido na restauração da ergodicidade em simulações e permite a observação de transições de fase e mudanças nos valores de energia que não seriam observadas apenas com o uso do método *Single-Spin-Flip*, como mostrado na figura (17). Isso demonstra a utilidade do princípio do *Worm* na simulação de sistemas magnéticos complexos.

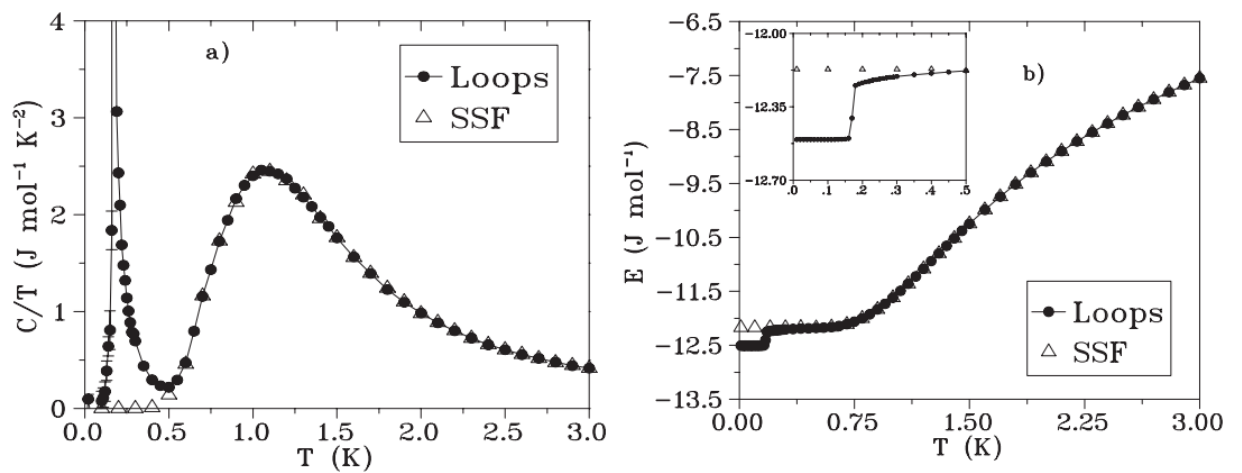


Figura 17 – Comparação do método de *Worm* juntamente ao método de *Single Spin Flip*. Percebe-se que com o uso dos loops fica nítida uma transição de fase na escala de temperatura $T_c \approx 0.18K$ (esquerda), assim como uma queda no valor de energia (direita) que não seria prevista apenas com o uso do *Single Spin Flip*. Em (a) tem-se o calor específico magnético e em (b) o valor de energia, ambas para uma amostra de $Dy_2Ti_2O_7$. Isso possibilita portanto uma boa fundamentação quanto ao uso do princípio de *Worm*. Retirado de: [41]

4 GSA no Ladrilho de Penrose

Money, it's a crime
 Share it fairly, but don't take a
 slice of my pie
 Money, so they say
 Is the root of all evil today

Money - Pink Floyd

Os quasicristais são materiais que chamam muita atenção por suas propriedades peculiares, pois acreditou-se por muito tempo que arranjos não periódicos em duas dimensões não poderiam existir na natureza. Essa crença foi desafiada quando Roger Penrose propôs um conceito revolucionário para a criação de padrões não periódicos, resultando no famoso Ladrilho de Penrose. A elaboração de arranjos não periódicos em duas dimensões representa uma quebra com a ideia tradicional de estruturas cristalinas regulares e repetitivas.

No contexto do Ladrilho de Penrose, as propriedades magnéticas também têm sido alvo de estudos. Modelos como o de spins de Heisenberg são utilizados para entender como os momentos magnéticos se comportam nesse sistema complexo [42].

Os ladrilhos de Penrose existem de diversas formas distintas. Atualmente as principais formas de se construir um ladrilho de Penrose consistem em agrupar, seguindo regras específicas, um conjunto de pipas e dardos (*Kite and Dart*) ou de dois losangos (*Rombus*) diferentes. Bhat et al. [43] construíram redes de Permalloy baseadas na forma kite and dart, onde os elementos magnéticos estão conectados formando uma rede contínua. Essas redes foram investigadas usando sondas macroscópicas de magnetometria SQUID e FMR, revelando campos bem definidos e uma estrutura de modos. A imagem magnética desses padrões revelou subredes ordenadas e frustradas espacialmente distintas, além de reversão por meio de vórtices, formando estados transitórios metaestáveis. Os dados de magnetização estática e dinâmica foram simulados usando o código OOMMF. Foram estudadas amostras de gelos de spin artificiais quasicristalinos de diferentes gerações ⁵. Os dados experimentais e de simulação mostram a presença de anomalias nos gráficos de magnetização em função do campo magnético, conhecidas como "*knees*".

A presença e características desses knees dependem da geração (tamanho) das amostras e da temperatura. Mapas de magnetização simulados mostram que esses knees estão associados a reversões abruptas de subconjuntos de segmentos dos gelos de spin artificiais.

⁵ Nos métodos de construção do ladrilho de Penrose baseados em inflação/deflação, um sistema inicial vai sendo subdividido em estruturas menores. Cada vez que o processo de subdivisão é realizado, dizemos que uma nova geração foi obtida. Essencialmente, quanto mais gerações obtemos, maior será o sistema.

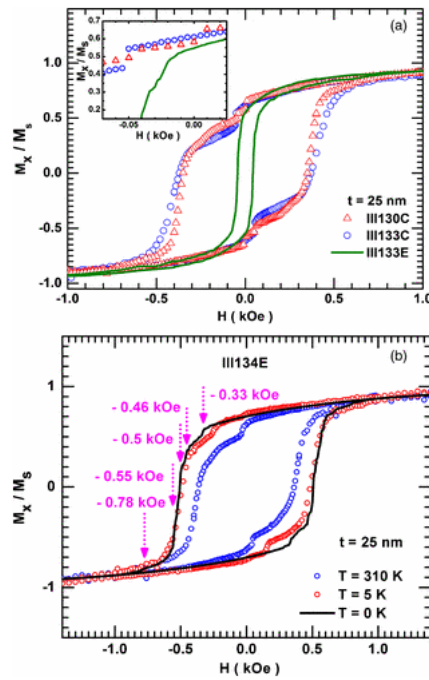


Figura 18 – (a) Magnetização M_X horizontal em corrente contínua normalizada para o valor de saturação M_S em função do campo magnético H aplicado para as amostras III130C (8^a geração), III133C (12^a geração) e III133E (3^a geração) a uma temperatura $T = 310$ K. (b) $M_X = M_S$ para a amostra III134E em função de H para $T = 310$ e 5 K, comparada com a magnetização simulada (linha preta) a $T = 0$ K. Os "knees" na curva simulada $M(H)$ são indicados por setas. Retirado de: [43]

Outro ponto relevante nas pesquisas sobre GSA no ladrilho de Penrose é a compreensão das propriedades emergentes desses sistemas interagentes. Dong Shi et al. [44] também estudaram um GSA no ladrilho de Penrose. Ao contrário do sistema abordado por Bhat et al. [43], eles consideraram uma estrutura composta apenas por losangos. Uma diferença considerável neste caso é que todas as arestas do ladrilho considerado tem o mesmo comprimento, o que permitiu construir uma rede com nanoilhas não conectadas de mesmo tamanho. Desta forma, todas as nanoilhas tem a mesma temperatura paramagnética de bloqueio, o que é importante para definir um protocolo simples de recristalização térmica.

Essa configuração apresenta uma estrutura esquelética quasi-unidimensional que abrange todo o ladrilho e exhibe ordem de longo alcance. Além disso, eles indentificaram grupos de spins que podem mudar de orientação a um custo energético ínfimo, gerando uma degenerescência macroscópica. Por meio de microscopia de força magnética, os pesquisadores observaram ainda a formação de "superdomínios" num GSA no ladrilho de Penrose. A figura (20) representa o sistema estudado em [44] e os sete diferentes tipos de vértices presentes.

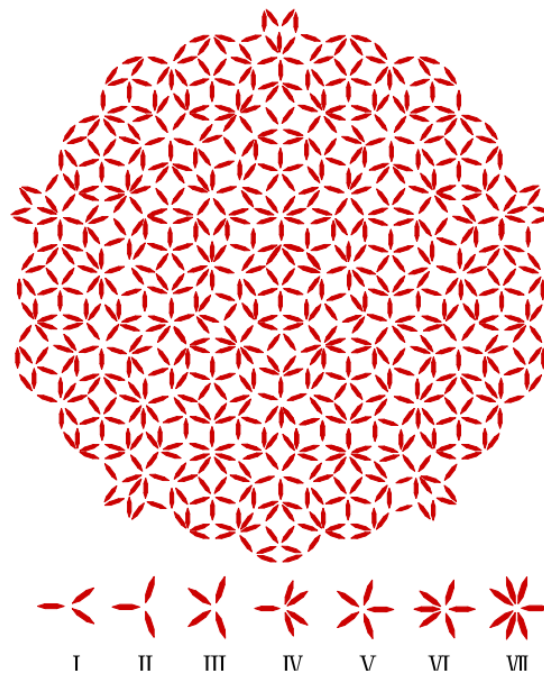


Figura 19 – Padrão do tipo P3. Cada tipo de vértice dentro dele possui uma geometria e número de coordenação distintos. Retirado de: [44]

O fato de as ilhas não estarem conectadas permite ajustar a força de acoplamento variando o espaçamento entre elas. Foram determinadas configurações de energia mais baixa baseadas em interações de vizinhos mais próximos, nas quais os spins se separam em dois grupos. Uma estrutura esquelética atravessa a rede de Penrose, formando uma estrutura com um estado fundamental único (a menos uma inversão global dos spins). E uma estrutura envolve grupos de spins que levam à degenerescência macroscópica.

No trabalho de Dong Shi três protocolos diferentes para termalizar esse sistema são analisados: recristalização térmica durante a fabricação para produzir um estado termalizado logo após o crescimento, desmagnetização de corrente alternada e recristalização térmica. Uma termalização efetiva leva a superdomínios dentro da estrutura esquelética separados por paredes semelhantes ao modelo de Ising. Os superdomínios são maiores em uma amostra recristalizada com forte acoplamento entre as ilhas. Porém, não vamos nos ater a tal informação.

4.1 Estudo do Estado Fundamental

A configuração magnética do GSA no ladrilho de Penrose considerado por Dong Shi et al. [44] segue uma regra similar ao gelos de spin do padrão quadrado e kagome, ou seja, os spins de cada vértice apontam para dentro e para fora alternadamente para minimizar a energia total. Em alguns vértices, a incapacidade de satisfazer essa regra alternada,

combinada com os ângulos desiguais entre os spins vizinhos, gera uma degenerescência no nível dos vértices. Uma característica notável é que essa degenerescência pode ser suprimida ou surgir quando os vértices são excitados para o próximo nível de energia.

Após determinar os estados de menor energia dos vértices individuais, eles foram unidos para formar o arranjo completo de Penrose usando um processo de etapas lógicas. A ideia é que o padrão de Penrose pode ser construído a partir de decágonos, embora o estudo utilize um conjunto diferente de decágonos menores. Primeiro, os vértices foram unidos para formar dois tipos diferentes de decágonos, que foram então combinados para formar o padrão completo mostrado na figura (20).

Enquanto algumas degenerescências no nível dos vértices são levantadas, novas degenerescências surgem. Devido ao grau diferente de degenerescência de diferentes tipos de vértices, alguns spins que possuem degenerescência dupla no nível do vértice levantarão suas degenerescências quando conectados juntos e formarão uma estrutura rígida que se estende por todo o arranjo. Essa estrutura é chamada de "*esqueleto*" e é representada pelos spins em preto na figura (20). O esqueleto possui um estado fundamental único (com simetria de inversão), o que significa que possui ordem de longo alcance no sentido de que especificar a direção de um único spin é suficiente para determinar toda a sua configuração de estado fundamental.

As lacunas dentro do esqueleto são ocupadas por grupos de spins que podem ser "*virados*" como um grupo sem alterar a energia do arranjo como um todo na aproximação de interações apenas entre vizinhos mais próximos considerada no trabalho. Esses grupos são mostrados como setas vermelhas ou azuis na figura (20) e correspondem aos vértices dos tipos V, VI e VII. Os grupos de spins marcados em vermelho cercam vértices do tipo VI ou VII e possuem duas configurações degeneradas e reversas. Os grupos marcados em azul cercam vértices do tipo V, que têm uma simetria de rotação quintupla. Como resultado, a configuração dos spins também tem uma degenerescência de rotação quintupla, onde cada configuração possui uma parceira degenerada e reversa. Espera-se que esses spins viráveis sejam muito mais suscetíveis a flutuações térmicas do que aqueles no esqueleto. O fato de esses grupos não participarem do esqueleto de ordem de longo alcance significa que o quasicristal magnético artificial como um todo possui degenerescência macroscópica.

4.1.1 Estudos dos Vértices

Ainda considerando os estudos feitos por Dong Shi et al. [44] as distribuições dos diferentes tipos de vértices observadas experimentalmente foram comparadas com os resultados das simulações de Monte Carlo. Houve uma concordância geral entre os resultados experimentais para os estados termicamente recristalizados e os resultados das simulações de Monte Carlo, o que é considerado como uma evidência adicional de que

os estados recristalizados ⁶ estão bem termalizados. No entanto, o estado de crescimento apresentou má termalização. O grau de correlação entre as ocupações dos níveis de energia nos estados termalizados observados e simulados foi quantificado determinando o valor ajustado de R_2 , que foi de apenas 0,68 para o estado de crescimento, mas de até 0,97 para o estado termicamente recristalizado. Uma característica que surge para os vértices do tipo II e tipo VII segundo [44] nos estados termalizados é que mais vértices são encontrados no primeiro estado excitado E2, em vez do nível de energia do vértice mais baixo E1. Isso ocorre não apenas nos dados experimentais termicamente recristalizados, mas também nas simulações. Estes resultados são apresentados na figura (21).

Para os vértices do tipo II, essa característica pode ser explicada pelo fato de que ter todos os vértices no estado de energia mais baixo não pode ser acomodado pelo estado fundamental do padrão como um todo devido à frustração emergente. No entanto, esse argumento não se aplica aos vértices do tipo VII. Para entender o que ocorre [44] calcula uma estimativa da temperatura de bloqueio (TB) ⁷ para as nano-ilhas, usando a expressão:

$$K_b T_b \ln\left(\frac{t_m}{t_0}\right) = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2(T_B) DV \quad (4.1)$$

onde t_m é o tempo de medição, t_0 é o tempo de tentativa que é assumido com um valor típico de 10^{-10} s, μ_0 é a permeabilidade do espaço livre, M_s é a magnetização de saturação, D representa o fator de desmagnetização de uma ilha, e V é o volume médio das ilhas.

Através dessa estimativa, os vértices do tipo VII têm uma temperatura de bloqueio mais baixa em comparação aos vértices do tipo II. Isso significa que, para os vértices do tipo VII, o estado E2 pode ser mais facilmente alcançado em comparação com o estado de menor energia E1, devido à temperatura mais baixa em que o estado E1 se torna acessível. Assim, há mais vértices do tipo VII no estado E2 o que é consistente com os resultados das simulações de Monte Carlo.

⁶ A recristalização ocorre quando o sistema é aquecido ou resfriado através de sua temperatura de bloqueio. Quando um gelo de spin é aquecido acima de sua temperatura de bloqueio, os spins magnéticos começam a se desordenar, perdendo sua orientação magnética global. De forma diferente, quando o gelo de spin é resfriado abaixo de sua temperatura de bloqueio, os spins magnéticos começam a se ordenar e a exibir uma orientação magnética global.

⁷ A temperatura de bloqueio é a temperatura abaixo da qual a ordem magnética emerge no gelo de spin. A uma temperatura acima da temperatura de bloqueio, os spins magnéticos estão desordenados e não mostram um alinhamento magnético global significativo. À medida que a temperatura diminui e se aproxima da temperatura de bloqueio, os spins começam a se alinhar e exibir ordem magnética.

4.1.2 Perspectivas no estudo dos GSA no ladrilho de Penrose

A conexão entre geometria e frustração limita a maneira de como se pode projetar novas redes para estudar a frustração. No entanto, é possível contornar essa limitação indo além de sistemas em que a frustração é o resultado de interações em pares e, em vez disso, localizar a frustração nos próprios vértices. Uma forma de alcançar isso é em sistemas de coordenação mista, onde os diferentes tipos de vértices têm configurações de baixa energia bem definidas, mas estão dispostos de tal forma que nem todos os vértices podem assumir sua configuração de menor energia. Esses vértices insatisfeitos fornecem excitações topologicamente protegidas acima do estado fundamental e, em geometrias apropriadas, a degenerescência da alocação desses vértices cresce exponencialmente com o tamanho do sistema, levando a um conjunto degenerado de baixa energia.

Embora o estado fundamental do padrão de Penrose tenha sido previsto vide figura (20), é necessário realizar validação experimental para confirmar sua validade de acordo com [44]. Apesar do estudo de Dong Shi elucidar muitas características do sistema ele não fornece uma compreensão mais aprofundada das propriedades termodinâmicas e das possíveis fases apresentadas. Optamos então por estudar a termodinâmica de um ladrilho de Penrose seguindo o procedimento delineado no apêndice A.

Como descrito no Capítulo 2, usamos durante o processo de estudo das propriedades termodinâmicas apenas as interações dipolares entre dipolos pontuais com longo alcance. A diante seguem os resultados das simulações.

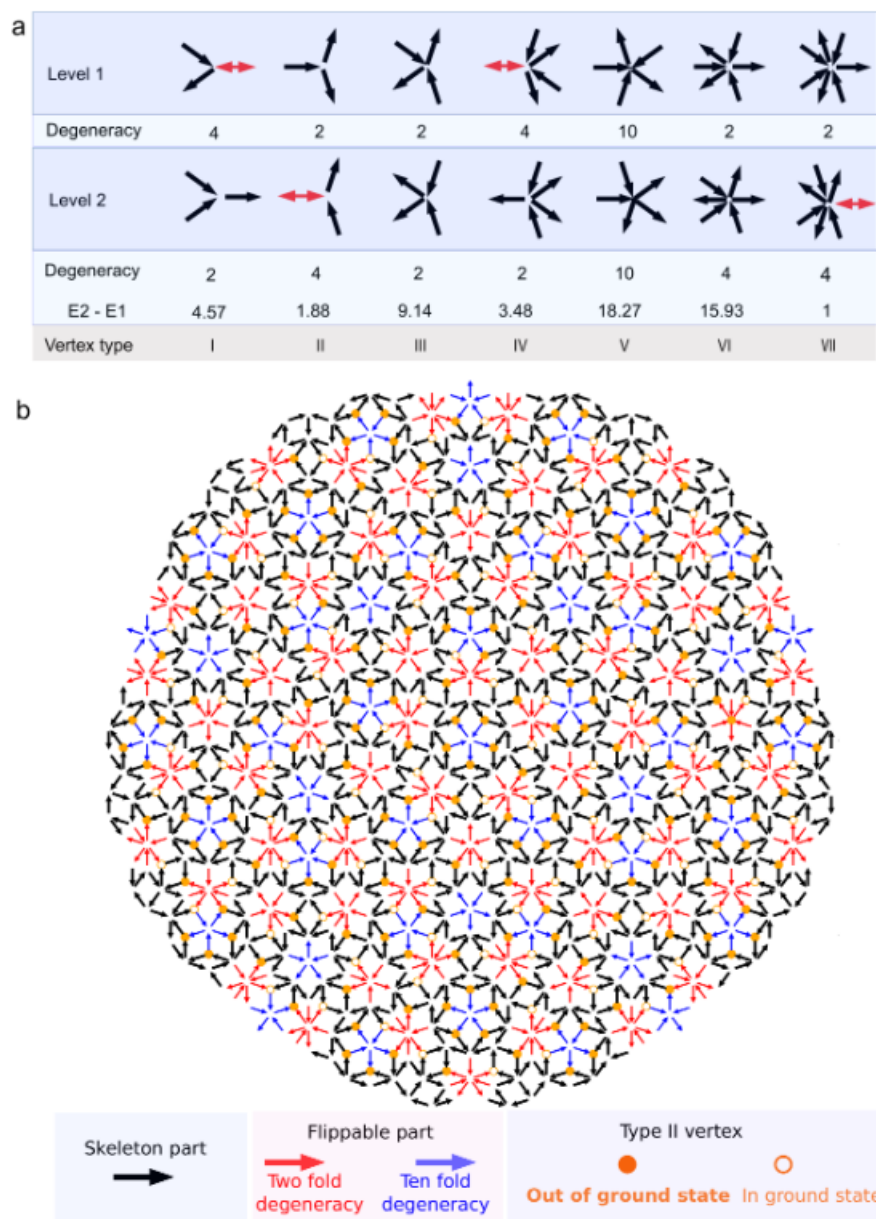


Figura 20 – (a) As configurações de menor energia (nível 1) e segunda menor energia (nível 2) para cada tipo de vértice isoladamente são mostradas. As setas vermelhas de duas pontas denotam que os momentos podem apontar para qualquer uma das duas direções sem alterar a energia total do vértice. (b) Uma configuração de baixa energia de todo o padrão de Penrose é mostrada, construída juntando os vértices em decágonos e, em seguida, combinando os decágonos. As setas pretas representam o esqueleto magneticamente rígido, que possui um estado fundamental único. As setas vermelhas e azuis representam grupos viráveis que têm configurações degeneradas dentro do arranjo: degeneração de duas direções para vermelho e degeneração de dez direções para azul. Os círculos laranjas representam os vértices do tipo II que podem ser forçados a sair de seu estado fundamental no nível do vértice devido à frustração emergente induzida topologicamente. Os círculos preenchidos indicam uma possível configuração de vértices excitados; os círculos abertos são aqueles que permaneceram em seu estado fundamental no nível do vértice neste caso particular. Retirado de: [44]

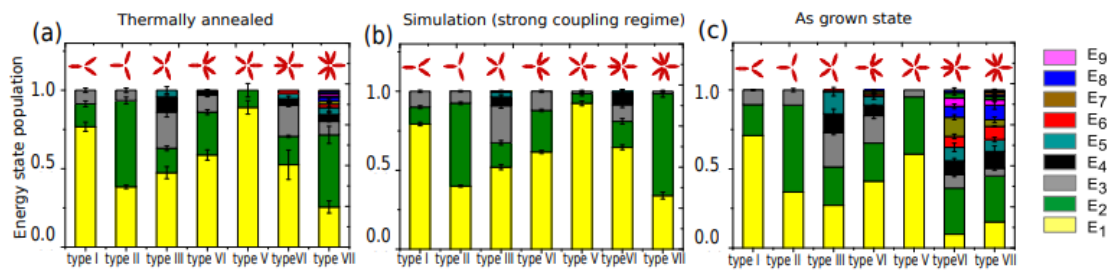


Figura 21 – (a) Populações para cada tipo de vértice para o estado termicamente tratado. (b) Simulação de Monte Carlo (c) e o estado não termicamente tratado são representadas em gráficos de colunas. As populações experimentais para o caso termicamente tratado se assemelham fortemente aos resultados bem termalizados da simulação de Monte Carlo. Retirado de: [44]

5 Resultados

Deixando a profundidade de
lado
Eu quero é ficar colado à pele
dela noite e dia
Fazendo tudo e de novo dizendo
sim à paixão, morando na
filosofia

Divina Comédia Humana -
Belchior

Para a análise das propriedades termodinâmicas do Ladrilho de Penrose, foram calculadas várias grandezas por meio de simulações. Agora apresentaremos os resultados obtidos para a condição de contorno aberta. Assim como uma apresentação breve da população dos rombos à medida que a temperatura do sistema aumenta.

5.1 Propriedades Termodinâmicas

As principais grandezas calculadas foram:

1. Energia: A energia do sistema é calculada como a soma das interações entre os momentos magnéticos dos spins, levando em consideração as interações dipolares entre spins vizinhos. A energia é calculada a cada passo de Monte Carlo e usada para análise das propriedades termodinâmicas.
2. Magnetização: A magnetização mede a tendência dos spins de se alinharem.
3. Calor específico: O calor específico é uma medida da capacidade do sistema de absorver energia térmica.
4. Susceptibilidade magnética: A susceptibilidade magnética é uma medida da resposta do sistema a um campo magnético externo.

Essas propriedades termodinâmicas são calculadas em cada etapa do algoritmo de Monte Carlo, permitindo a análise e o acompanhamento das mudanças no sistema à medida que a temperatura é reduzida. A obtenção de médias ao longo do tempo permite uma avaliação estatisticamente significativa das propriedades termodinâmicas do sistema de ladrilho de Penrose. Matematicamente, as propriedades são expressas por:

- Energia por spin:

$$\mathcal{E} = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} \quad (5.1)$$

- Magnetização:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_i^N S_i^x \right)^2 + \left(\sum_i^N S_i^y \right)^2} \quad (5.2)$$

- Calor Específico:

$$C = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{N K_b T^2} \quad (5.3)$$

- Susceptibilidade Magnética:

$$\chi_M = \frac{\langle \mathcal{M}^2 \rangle - \langle \mathcal{M} \rangle^2}{N K_b T} \quad (5.4)$$

onde N é o número total de spins da rede.

5.1.1 Condições de Contorno Abertas

A condição de contorno aberta em um sistema significa que o sistema possui uma certa finitude ou restrição em termos espaciais ou de variáveis específicas. Isso pode se referir a uma região interna do sistema ou a um conjunto específico de variáveis. No entanto, é importante ter cuidado ao considerar sistemas pequenos com condições de contorno abertas, pois as interações na borda do sistema podem ter um papel muito relevante nas propriedades do sistema, o que não é desejável se estamos interessados no limite termodinâmico.

Em sistemas muito pequenos, a relação entre a borda e o volume do sistema bulk pode ser significativa, como discutido por Hill [45]. Nesses casos, a borda do sistema é relevante e pode afetar os resultados. Para mitigar os possíveis efeitos de borda, uma alternativa é utilizar condições de contorno periódicas, onde as bordas são tratadas como ambíguas, ou seja, onde uma borda termina, outra começa. Isso ajuda a eliminar os efeitos de borda e torna as propriedades do sistema mais representativas do interior, minimizando possíveis artefatos decorrentes das condições de contorno abertas. No entanto, é importante notar que a escolha entre condições de contorno abertas ou periódicas depende das características específicas do sistema em estudo e dos objetivos da análise. No presente trabalho, o sistema a ser analisado não possui simetria translacional, de forma que o uso de condições de contorno fechadas não é factível. Optamos, então, pelo uso de condições de contorno abertas mesmo estando cientes dos possíveis efeitos indesejados.

5.1.2 As Simulações

Para simular o ladrilho de Penrose, escrevemos um programa em linguagem *Fortran* que aplica o algoritmo de Metropolis e o Princípio de *Worm*. O programa inicia o sistema

de forma aleatória, posicionando cada spin de acordo com o tamanho do sistema e as subdivisões realizadas (conforme detalhado no Apêndice A). A temperatura T é definida inicialmente para conduzir a simulação. A sequência de passos de Monte Carlo utiliza portanto todos os métodos descritos no Capítulo 3.

Quando a temperatura é muito alta ($\beta < 0.02$), o programa realiza apenas um passo de Metropolis. Essa abordagem pode ser mais eficiente em regimes de alta temperatura, onde o Princípio de *Worm* não é tão relevante. Por outro lado, quando a temperatura é baixa ($\beta > 0.02$), o programa executa um passo de Metropolis, seguido de dois passos de *Worm* pois nessa situação esperamos que o *Worm* seja mais relevante. Essa escolha é corroborada ao observar a taxa de aceitação de cada umas dessas heurísticas e identificamos em quais condições cada algoritmo se destaca. Uma alta taxa de aceitação pode indicar que o algoritmo é mais eficiente em explorar o espaço de configuração e encontrar estados de menor energia. Por outro lado, uma baixa taxa de aceitação pode sugerir que o algoritmo está encontrando mais resistência ao tentar realizar mudanças de configuração.

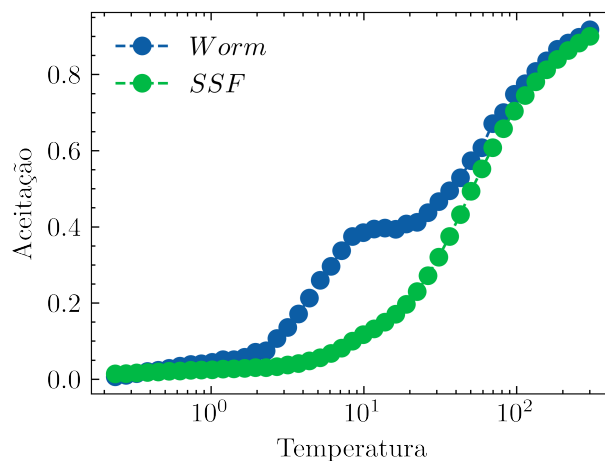


Figura 22 – Aceitação do SSF e Worm no ladrilho de Penrose.

O método de termalização utilizado é essencial para garantir que o sistema atinja um estado de equilíbrio térmico antes de começar a coletar dados para o cálculo das médias. Ao submeter o sistema a uma determinada temperatura, aguardamos um tempo de termalização de $\approx 10^3$ passos, garantindo assim que o sistema possa relaxar e alcançar uma estimativa adequada. Porém, é compreensível que, em algumas situações, seja necessário ajustar o número de passos de Monte Carlo (MCS) devido a restrições de tempo e custo computacional. A execução de simulações com um grande número de passos MCS pode ser demorada e exigir recursos computacionais consideráveis, especialmente para redes de maior geração. Ao realizar simulações para redes de 5ª e 7ª geração, a redução do número de passos MCS para $\approx 10^4$ é uma abordagem válida para otimizar o tempo e os recursos. Ainda assim, é importante notar que a termalização foi mantida na mesma escala, o que garante que o sistema tenha tempo suficiente para atingir um estado de equilíbrio térmico antes da coleta de dados.

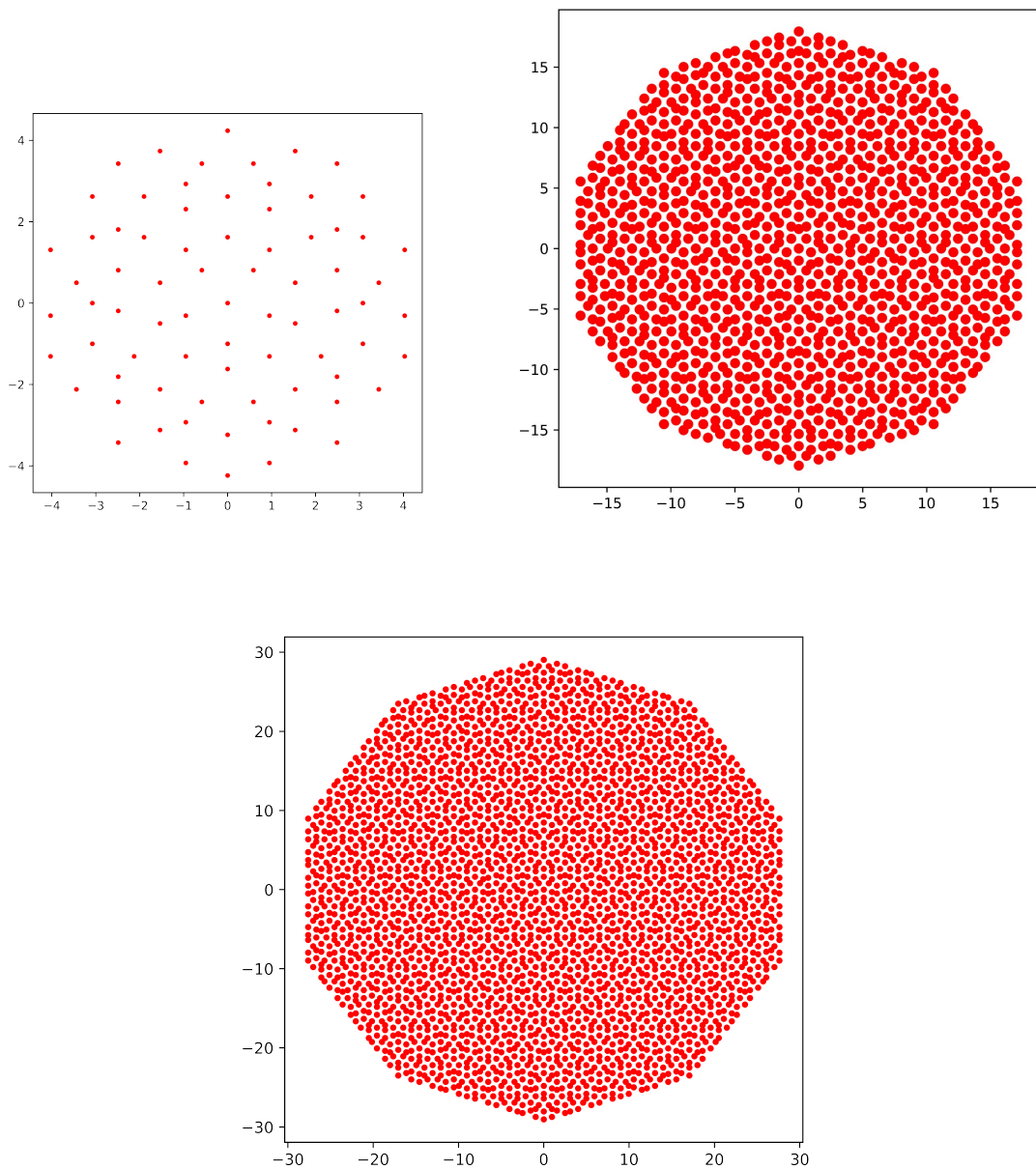


Figura 23 – Distribuição inicial dos vértices na 3^ª, 5^ª e 7^ª gerações do ladrilho de Penrose, respectivamente. A distribuição inicial dos vértices em cada geração contribui para a formação das estruturas quasicristalinas.

5.1.3 Resultados Preliminares usando o Single Spin Flip + Worm

O procedimento simulacional inicial consistiu em realizar um "*annealing térmico*" (resfriamento térmico). Nesse processo, o ladrilho de Penrose foi submetido a uma redução gradual da temperatura, buscando encontrar o estado fundamental do sistema. O annealing térmico começou com uma temperatura inicial $T_i = 300.0 D/K_b$. A partir daí, a temperatura das amostras foi reduzida exponencialmente com um fator de 80%, ou

seja, fizemos $T_{n+1} = 0.80 \times T_n$, até chegar a uma temperatura final $T_f = 0.01 D/K_b$. Nesse ponto, a aceitação de qualquer passo de Monte Carlo tentado se torna altamente improvável, indicando que o sistema atingiu um estado de baixa energia, ou seja, o estado fundamental.

Essas amostras serão usadas como pontos de partida para a realização de simulações adicionais em temperaturas específicas, permitindo a análise de propriedades termodinâmicas e comportamentos do sistema em diferentes regimes térmicos. Como se segue nas figuras (24) e (25) mostramos os resultados obtidos para energia, calor específico, magnetização e susceptibilidade magnética, respectivamente.

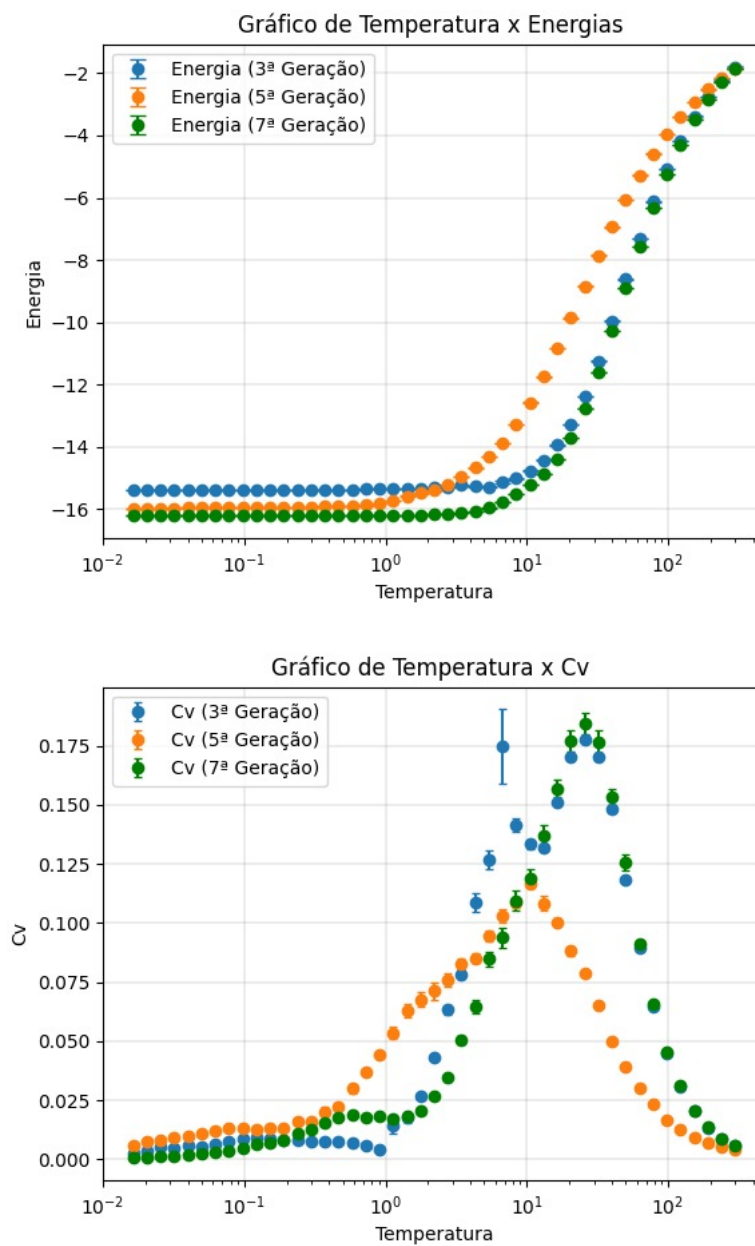


Figura 24 – Resultado da energia média por spins (nanoilha) e calor específico em função da temperatura definida nos protocolos de simulação.

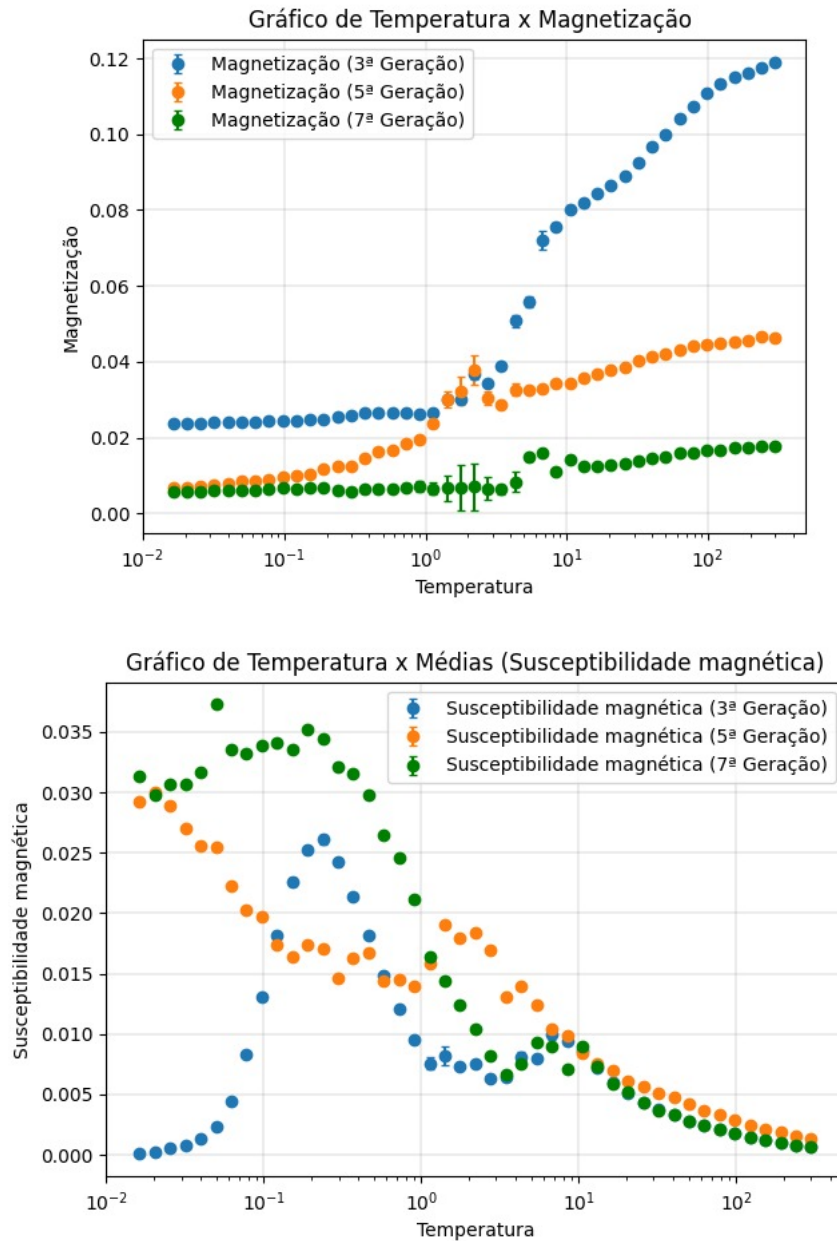


Figura 25 – Resultado da magnetização e susceptibilidade magnética em função da temperatura definida nos protocolos de simulação.

Como pode ser observado, o comportamento da energia é monotonicamente crescente, como esperado.

O calor específico, apresenta um comportamento rico. Para a rede com 3 gerações observamos que para temperaturas entre 10^{-2} e 1 há um pequeno pico, mas não há indícios nesse momento que ele possa estar relacionado a uma transição de fase. Há ainda outros dois picos, um para $T \sim 8D/K_b$ e outro em $T \sim 20D/K_b$. Ao aumentar o tamanho do sistema os picos se deslocam para temperaturas menores e há indícios que eles tendem a se juntar, provavelmente indicando a presença de uma única transição no limite termodinâmico.

A magnetização do sistema se mantém baixa em todas as temperaturas analisadas, o que confere pouca segurança aos dados de susceptibilidade, especialmente para redes com gerações maiores.

Durante as simulações, analisamos também o valor total da carga magnética no sistema. No entanto, observamos que ao utilizar as condições de contorno abertas: a carga magnética manteve em um valor muito próximo de zero para todas as temperaturas estudadas. Embora tenhamos obtido resultados consistentes com a conservação da carga, optamos por não incluir o gráfico no trabalho.

Ao término das simulações realizadas em Fortran, tivemos a oportunidade de visualizar a configuração final do ladrilho de Penrose através do OVITO (*Open Visualization Tool*). Além disso, a visualização no OVITO facilita a comparação e a interpretação dos resultados obtidos, permitindo uma validação mais eficiente de nossos dados. A seguir, na figura (26) apresentamos o resultado final.

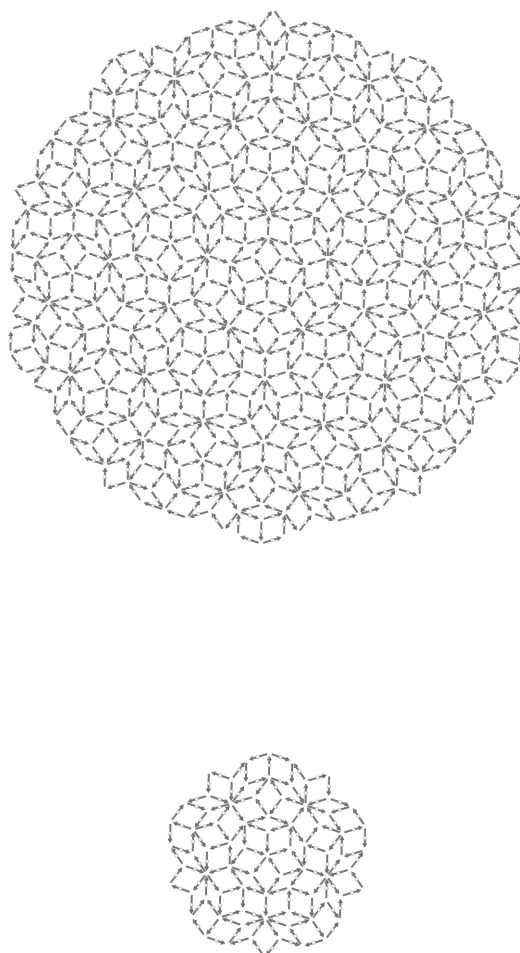


Figura 26 – Resultado final dos ladrilhos de Penrose da 3^o geração (menor) e 5^o geração (maior).

5.2 Rombos

Os rombos no ladrilho de Penrose consistem em uma série de losangos e formas geométricas interconectadas, de forma que, os padrões se estendem indefinidamente sem uma forma aparente. O ladrilhamento é composto por dois tipos de losangos: "*fat rhombi*" e "*thin rhombi*". O plano é coberto de forma aperiódica, apresentando uma característica peculiar de simetria "*five-fold*" ou "*ten-fold*", que são simetrias rotacionais presentes nos padrões do ladrilho. As configurações podem ser agrupadas em 4 tipos de acordo com suas energias, conforme indicado na figura (27):

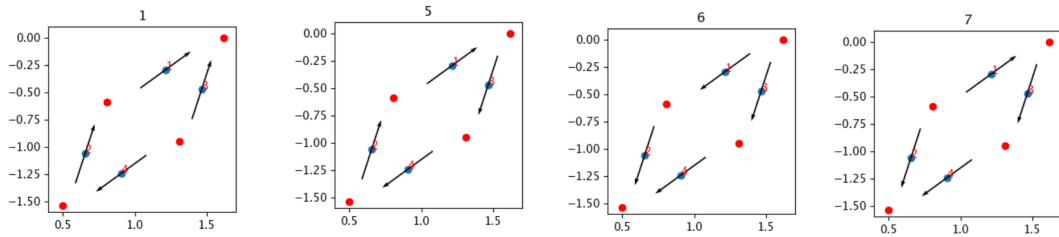


Figura 27 – O rombo 5 forma um loop e possui a menor energia entre os rhombus mencionados. O rombo 6 apresenta momentos magnéticos espelhados. O rombo 7 é obtido ao inverter apenas um elemento do losango. Já o rombo 1 apresenta pares de alinhamento cabeça-cabeça e cauda-cauda, e possui a maior energia entre os rhombus citados anteriormente.

Analisamos também a população dos losangos no ladrilho de Penrose com a variação da temperatura e usando a mesma ideia implementada por [44] a partir das energias que cada rombo apresenta. A população dos rhombos refere-se à frequência com que cada uma das diferentes topologias mostradas na figura (28) aparecem na estrutura do material. Observamos que, à medida que a temperatura aumenta, há um rearranjo na distribuição dos rhombos, o que sugere uma alteração na estrutura do sistema em resposta ao aumento de energia térmica. Essa mudança na população de rhombos pode fornecer informações importantes sobre as propriedades termodinâmicas, como transições de fase e comportamento em diferentes regimes de temperatura.

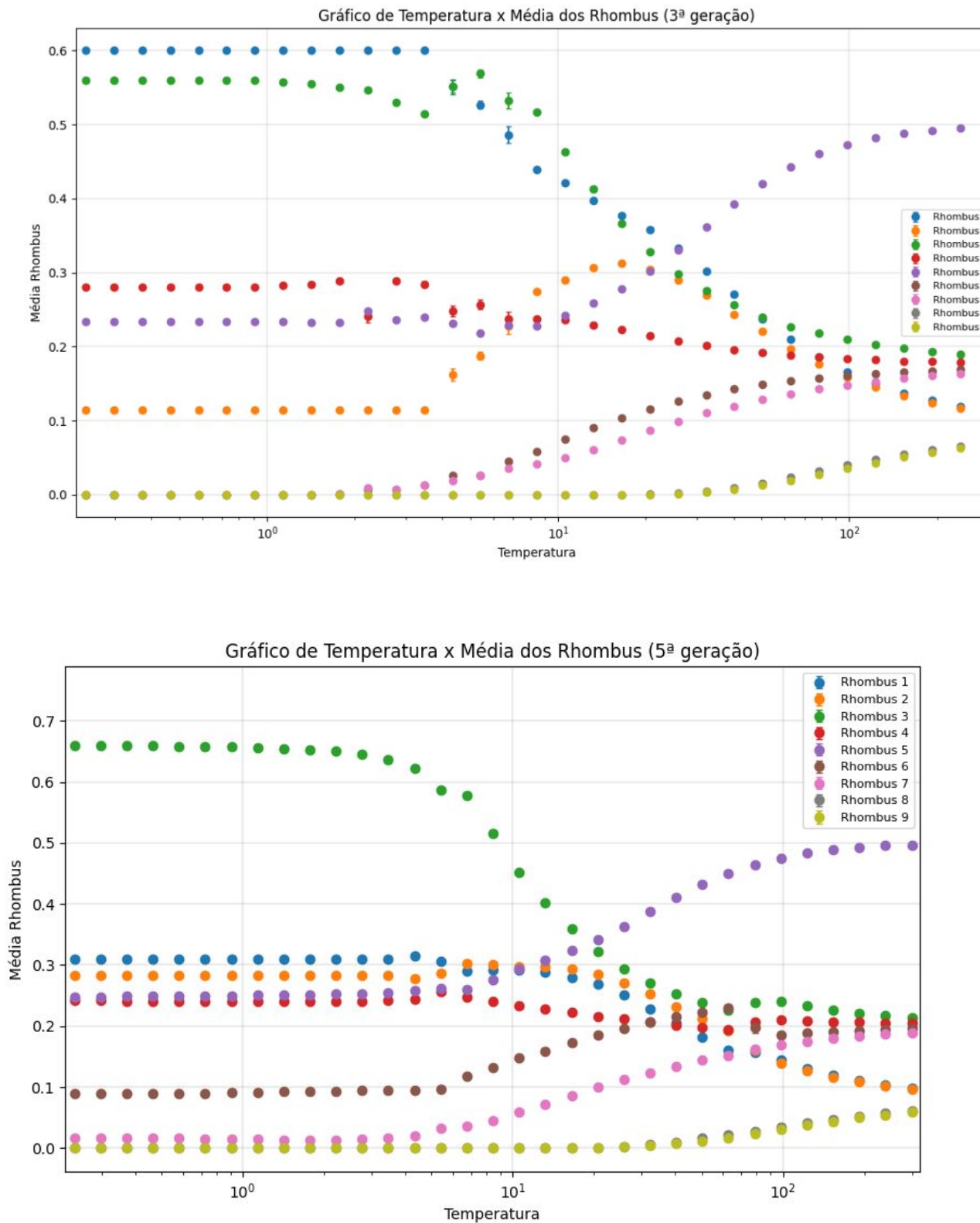


Figura 28 – A população dos diferentes rhombos pode ser analisada em função da configuração de energia e da temperatura. É evidente que, no estado inicial, os rhombos com energia zero (representados pelos pontos verdes) são mais numerosos, porém, à medida que a temperatura aumenta, sua presença diminui gradualmente.

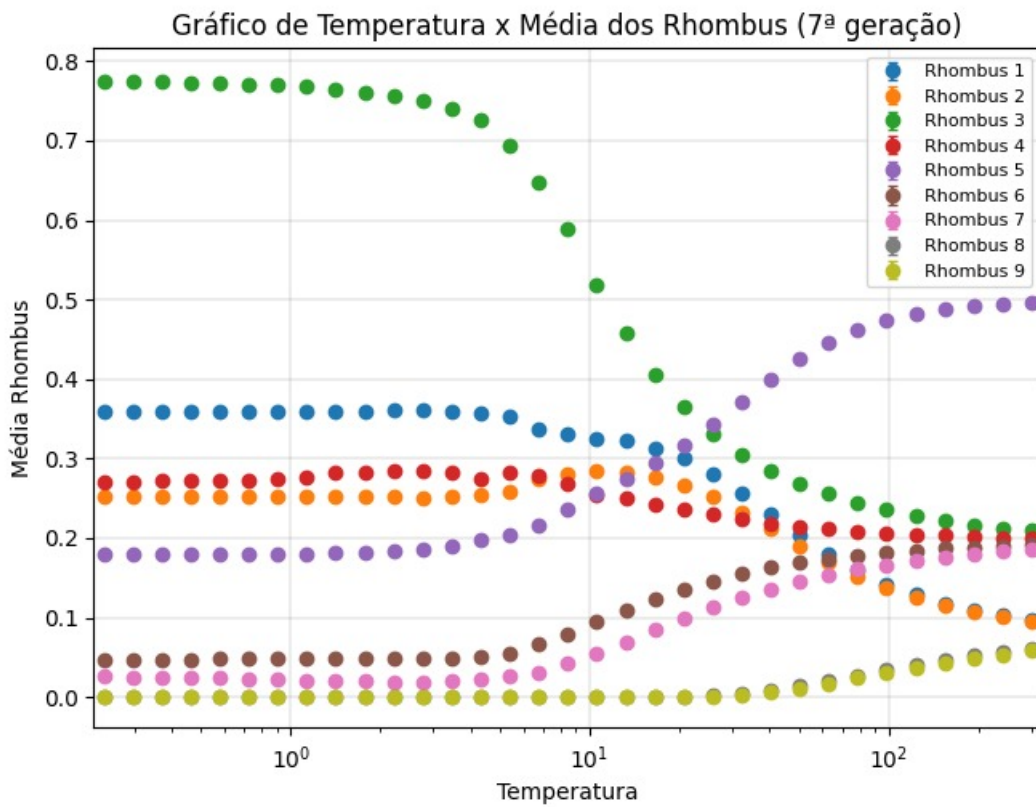


Figura 29 – A população dos diferentes rhombos pode ser analisada em função da configuração de energia e da temperatura. É evidente que, no estado inicial, os rhombos com energia zero (representados pelos pontos verdes) são mais numerosos novamente, porém, à medida que a temperatura aumenta, sua presença diminui gradualmente.

6 Conclusão

It took so long, to realize
 And I can still hear her last
 goodbyes
 Now all my days, are filled with
 tears
 Wish I could go back, and
 change these years

Changes - Black Sabbath

Conforme a proposta inicial deste trabalho, estudamos os GSA's no ladrilho de Penrose e buscamos entender as principais propriedades termodinâmicas. Os resultados obtidos se mostraram interessantes e apresentaram comportamentos peculiares não inicialmente estudados por Dong Shi et al. [44] (Propriedades Termodinâmicas e a Distribuição de Rombos por Energia). Mais especificamente, o comportamento do calor específico do sistema se mostrou rico indicando a possível presença de fases intermediárias.

Com o crescimento do número de spins em cada sistema, o tempo computacional é cada vez maior e programas mais pesados se tornam uma realidade inescapável. Essa situação representa um desafio significativo no contexto da codificação e simulação de sistemas complexos.

Devido ao pouco tempo disponível no mestrado e as dificuldades encontradas para implementar o programa, principalmente o *Worm*, não foi possível fazer uma análise mais detalhada do sistema. Esta análise será tema para trabalhos futuros. É importante ressaltar, que os programas utilizados neste trabalho foram desenvolvidos pelo autor.

A persistência de um padrão intrigante nas simulações de calor específico por geração indica que esse fenômeno pode ser uma característica interessante e robusta do sistema do ladrilho de Penrose. Isso reforça a relevância de continuar investigando a termodinâmica do GSA no ladrilho de Penrose, pois esses comportamentos incomuns podem fornecer insights valiosos sobre as propriedades físicas desse sistema.

Como perspectivas futuras, pode-se estudar nesta mesma geometria as possíveis transições de fase. Utilizando, por exemplo, os zeros da função geradora de momentos [46] esta análise pode auxiliar na compreensão das propriedades termodinâmicas do GSA no ladrilho de Penrose e fornecer informações valiosas sobre a presença de fases ordenadas e desordenadas, bem como a natureza dessas transições.

Referências

- [1] Berhanu, Michaël, Romain Monchaux, Stéphan Fauve, Nicolas Mordant, François Pétrélis, Arnaud Chiffaudel, François Daviaud, Bérengère Dubrulle, Louis Marié, Florent Ravelet *et al.*: *Magnetic field reversals in an experimental turbulent dynamo*. *Europhysics Letters*, 77(5):59001, 2007. Citado na página 12.
- [2] Dirac, Paul Adrien Maurice: *Quantised singularities in the electromagnetic field*. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 133(821):60–72, 1931. Citado na página 12.
- [3] Nambu, Yoichiro: *Strings, monopoles, and gauge fields*. *Physical Review D*, 10(12):4262, 1974. Citado na página 12.
- [4] Polyakov, Alexander M: *Particle spectrum in quantum field theory*. Em *30 years of the Landau institute—selected papers*, páginas 540–541. World Scientific, 1996. Citado na página 12.
- [5] Kim, BJ, H Koh, E Rotenberg, S J Oh, H Eisaki, N Motoyama, S i Uchida, T Tohyama, S Maekawa, Z X Shen *et al.*: *Distinct spinon and holon dispersions in photoemission spectral functions from one-dimensional SrCuO₂*. *Nature Physics*, 2(6):397–401, 2006. Citado na página 15.
- [6] Callaway, David JE: *Random matrices, fractional statistics, and the quantum Hall effect*. *Physical Review B*, 43(10):8641, 1991. Citado na página 15.
- [7] Bernal, John D e Ralph H Fowler: *A theory of water and ionic solution, with particular reference to hydrogen and hydroxyl ions*. *The Journal of Chemical Physics*, 1(8):515–548, 1933. Citado na página 18.
- [8] Castelnovo, Claudio, Roderich Moessner e Shivaji L Sondhi: *Magnetic monopoles in spin ice*. *Nature*, 451(7174):42–45, 2008. Citado 5 vezes nas páginas 18, 21, 22, 23 e 24.
- [9] Gingras, Michel JP: *Spin ice*. arXiv preprint arXiv:0903.2772, 2009. Citado na página 19.
- [10] Bramwell, Steven T e Michel JP Gingras: *Spin ice state in frustrated magnetic pyrochlore materials*. *Science*, 294(5546):1495–1501, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.

- [11] Giaouque, William F e Muriel F Ashley: *Molecular rotation in ice at 10 k. free energy of formation and entropy of water*. Physical review, 43(1):81, 1933. Citado na página 18.
- [12] Pauling, Linus: *The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement*. Journal of the American Chemical Society, 57(12):2680–2684, 1935. Citado na página 19.
- [13] Giaouque, WF e JW Stout: *The Entropy of Water and the Third Law of Thermodynamics. The Heat Capacity of Ice from 15 to 273° K*. Journal of the American Chemical Society, 58(7):1144–1150, 1936. Citado na página 19.
- [14] Harris, Mark J, ST Bramwell, DF McMorro, TH Zeiske e KW Godfrey: *Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore Ho₂Ti₂O₇*. Physical Review Letters, 79(13):2554, 1997. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 21.
- [15] Ramirez, Arthur P, A Hayashi, Robert Joseph Cava, R Siddharthan e BS Shastry: *Zero-point entropy in ‘spin ice’*. Nature, 399(6734):333–335, 1999. Citado na página 20.
- [16] Wang, 1 RF, C Nisoli, RS Freitas, J Li, W McConville, BJ Cooley, MS Lund, N Samarth, C Leighton, VH Crespi *et al.*: *Artificial ‘spin ice’ in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands*. Nature, 439(7074):303–306, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 25.
- [17] Tanaka, Masaaki, E Saitoh, H Miyajima, T Yamaoka e Y Iye: *Magnetic interactions in a ferromagnetic honeycomb nanoscale network*. Physical Review B, 73(5):052411, 2006. Citado na página 23.
- [18] Mól, LA, RL Silva, RC Silva, AR Pereira, WA Moura-Melo e BV Costa: *Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice*. Journal of Applied Physics, 106(6), 2009. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 26.
- [19] Möller, Gunnar e R Moessner: *Artificial square ice and related dipolar nanoarrays*. Physical Review Letters, 96(23):237202, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.
- [20] Silva, RC, RJC Lopes, LAS Mól, WA Moura-Melo, GM Wysin e AR Pereira: *Nambu monopoles interacting with lattice defects in a two-dimensional artificial square spin ice*. Physical Review B, 87(1):014414, 2013. Citado na página 27.
- [21] Mól, LAS, WA Moura-Melo e AR Pereira: *Conditions for free magnetic monopoles in nanoscale square arrays of dipolar spin ice*. Physical Review B, 82(5):054434, 2010. Citado na página 27.

- [22] Mól, LAS, AR Pereira e WA Moura-Melo: *Extending spin ice concepts to another geometry: The artificial triangular spin ice*. Physical Review B, 85(18):184410, 2012. Citado na página 27.
- [23] Ladak, Sam, DE Read, GK Perkins, LF Cohen e WR Branford: *Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system*. Nature Physics, 6(5):359–363, 2010. Citado na página 27.
- [24] Li, J, X Ke, S Zhang, D Garand, C Nisoli, P Lammert, VH Crespi e P Schiffer: *Comparing artificial frustrated magnets by tuning the symmetry of nanoscale permalloy arrays*. Physical Review B, 81(9):092406, 2010. Citado na página 28.
- [25] Morrison, Muir J, Tammie R Nelson e Cristiano Nisoli: *Unhappy vertices in artificial spin ice: new degeneracies from vertex frustration*. New Journal of Physics, 15(4):045009, 2013. Citado na página 28.
- [26] Skjærvø, Sandra H, Christopher H Marrows, Robert L Stamps e Laura J Heyderman: *Advances in artificial spin ice*. Nature Reviews Physics, 2(1):13–28, 2020. Citado na página 28.
- [27] Wang, RF, , J Li, W McConville, C Nisoli, X Ke, JW Freeland, V Rose, M Grimsditch, P Lammert, VH Crespi *et al.*: *Demagnetization protocols for frustrated interacting nanomagnet arrays*. Journal of applied physics, 101(9), 2007. Citado na página 29.
- [28] Morgan, Jason P, Aaron Stein, Sean Langridge e Christopher H Marrows: *Thermal ground-state ordering and elementary excitations in artificial magnetic square ice*. Nature Physics, 7(1):75–79, 2011. Citado na página 29.
- [29] Jayasekara, LAGD: *MONTE CARLO SIMULATIONS OF THE ISING MODEL ON A SQUARE LATTICE IN ABSENCE OF AN EXTERNAL FIELD*. Citado na página 29.
- [30] Gilbert, Ian, Gia Wei Chern, Sheng Zhang, Liam O’Brien, Bryce Fore, Cristiano Nisoli e Peter Schiffer: *Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice*. Nature Physics, 10(9):670–675, 2014. Citado na página 29.
- [31] LOPES, RICARDO JUNIOR CAMPOS: *Análise da termodinâmica e da fenomenologia de Gelos de Spin artificiais em geometrias exóticas*. 2016. Citado na página 30.
- [32] Jackson, John David: *Classical electrodynamics*, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.
- [33] Griffiths, David J: *Introduction to electrodynamics*, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.

- [34] De’Bell, K, AB MacIsaac e JP Whitehead: *Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems*. Reviews of Modern Physics, 72(1):225, 2000. Citado na página 35.
- [35] Landau, David e Kurt Binder: *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 37.
- [36] Binder, Kurt, David M Ceperley, J P Hansen, MH Kalos, DP Landau, D Levesque, H Mueller-Krumbhaar, D Stauffer e J J Weis: *Monte Carlo methods in statistical physics*, volume 7. Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 36.
- [37] Metropolis, Nicholas, Arianna W Rosenbluth, Marshall N Rosenbluth, Augusta H Teller e Edward Teller: *Equation of state calculations by fast computing machines*. The journal of chemical physics, 21(6):1087–1092, 1953. Citado na página 37.
- [38] Heermann, Dieter W e Dieter W Heermann: *Computer-simulation methods*. Springer, 1990. Citado na página 37.
- [39] Glauber, Roy J: *Time-dependent statistics of the Ising model*. Journal of mathematical physics, 4(2):294–307, 1963. Citado na página 38.
- [40] Melko, Roger G e Michel JP Gingras: *Monte Carlo studies of the dipolar spin ice model*. Journal of Physics: Condensed Matter, 16(43):R1277, 2004. Citado na página 39.
- [41] Jaubert, Ludovic DC, JT Chalker, Peter CW Holdsworth e R Moessner: *The Kasteleyn transition in three dimensions: Spin ice in a [100] field*. Em *Journal of Physics: Conference Series*, volume 145, página 012024. IOP Publishing, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 39, 40 e 41.
- [42] Szallas, Attila e Anuradha Jagannathan: *Spin waves and local magnetizations on the Penrose tiling*. Physical Review B, 77(10):104427, 2008. Citado na página 42.
- [43] Bhat, Vinayak Shantaram, Joseph Sklenar, B Farmer, J Woods, Jeffrey Todd Hastings, SJ Lee, John B Ketterson e Lance E De Long: *Controlled magnetic reversal in permalloy films patterned into artificial quasicrystals*. Physical review letters, 111(7):077201, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 43.
- [44] Shi, Dong, Zoe Budrikis, Aaron Stein, Sophie A Morley, Peter D Olmsted, Gavin Burnell e Christopher H Marrows: *Frustration and thermalization in an artificial magnetic quasicrystal*. Nature Physics, 14(3):309–314, 2018. Citado 9 vezes nas páginas 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 58 e 61.
- [45] Hill, Terrell L: *Thermodynamics of small systems*. Courier Corporation, 1994. Citado na página 51.

-
- [46] Rodrigues, Ronaldo Givisiez Melo *et al.*: *Zeros da função geradora dos momentos: uma nova abordagem para os zeros da função de partição*. 2021. Citado na página 61.
- [47] De Bruijn, Nicolaas Govert: *Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane. I, II: dedicated to G. Pólya*. *Indagationes mathematicae*, 43(1):39–66, 1981. Citado na página 68.
- [48] Duneau, Michel e André Katz: *Quasiperiodic patterns*. *Physical review letters*, 54(25):2688, 1985. Citado na página 68.
- [49] Elser, Veit: *The diffraction pattern of projected structures*. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, 42(1):36–43, 1986. Citado na página 68.
- [50] Kramer, Peter e Roberto Neri: *On periodic and non-periodic space fillings of E_m obtained by projection*. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, 40(5):580–587, 1984. Citado na página 68.
- [51] Wysin, Gary M, WA Moura-Melo, LAS Mól e AR Pereira: *Magnetic anisotropy of elongated thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays*. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(29):296001, 2012. Citado na página 71.

Apêndices

APÊNDICE A – Procedimento de Construção do Ladrilho de Penrose

O padrão aperiódico não exibe uma ordem de longo alcance, onde a posição de cada sítio pode ser determinada se o elemento inicial for conhecido. No entanto, o único artefato matemático que permite abordar esse padrão é a cadeia de Fibonacci no caso unidimensional. Além disso, não há outras abordagens para representar padrões aperiódicos.

Existem vários métodos para gerar o padrão de Penrose. Um deles é o método da autossemelhança, que gera um grande padrão de azulejos a partir de uma pequena célula da rede. Outro método é conhecido como o método de inflação/deflação. Um terceiro método, proposto por Brujin [47], envolve cortes específicos em uma rede cúbica de baixa dimensão, conhecido como método de corte e projeção. Ao longo do tempo, uma série de outros métodos foram desenvolvidos, permitindo a codificação do padrão de Penrose [48] [49] [50].

A.1 Ladrilho de Penrose

O algoritmo utilizado neste trabalho para criar ladrilho de Penrose se baseia no método de inflação/deflação e envolve uma lista de triângulos isósceles que são separados por cores vermelha e azul. A diferença principal está na angulação dos triângulos: um possui um ângulo de 36° e o outro possui um ângulo de 108° .



Figura 30 – Dois tipos de triângulos utilizados no método de inflação/deflação.

Na linguagem *Python*, os triângulos do ladrilho de Penrose podem ser representados como tuplas no formato (cor, A, B, C) , onde cada elemento da tupla possui as seguintes características:

- Cor: 0 indica um triângulo de 36° e 1 um triângulo de 108° .
- A, B, C: fornece as coordenadas dos vértices indexadas a partir de números complexos. A componente x é a coordenada real e a coordenada y a imaginária.

Ao fim, o método permite uma conexão de triângulos de mesma angulação e se formam os losangos que compõe o ladrilho de Penrose.

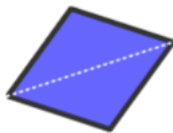


Figura 31 – unção de dois triângulos azuis formando um "fat rhombi".

Dessa forma, cada triângulo é definido pelas suas coordenadas e pela cor associada a ele. Essas informações permitem a construção e a manipulação do ladrilho de Penrose em *Python*.

A subdivisão dos triângulos do ladrilho de Penrose pode ser realizada de acordo com a proporção áurea. A seguir, apresento o esquema de subdivisão para cada tipo de triângulo:

1. Triângulo Vermelho:

Subdivisão: O triângulo vermelho pode ser subdividido em dois triângulos menores, um vermelho e um azul.

Proporção: A subdivisão ocorre de forma que o lado menor do triângulo vermelhoseja dividido na razão áurea (aproximadamente 0.618) em relação ao lado maior.

2. Triângulo Azul:

Subdivisão: O triângulo azul pode ser subdividido em três triângulos menores, dois azuis e um vermelho.

Proporção: A subdivisão ocorre de forma que os lados menores do triângulo azul sejam divididos na razão áurea (aproximadamente 0.618) em relação ao lado maior.

É possível obter o padrão de Penrose a partir de um padrão inicial circular e realizando as subdivisões adequadas nos triângulos. Essa abordagem é conhecida como "método de inflação/deflação".

Inicialmente, parte-se de um padrão circular que contém os triângulos iniciais necessários para construir o ladrilho de Penrose. Em seguida, aplica-se a subdivisão nos triângulos conforme as regras estabelecidas para cada tipo de triângulo, como mencionado anteriormente. Repetindo esse processo de subdivisão várias vezes, o padrão de Penrose começa a surgir gradualmente. Através desse método, é possível gerar ladrilhos de Penrose com diferentes níveis de detalhamento e complexidade. Quanto maior o número de subdivisões realizadas, mais detalhado e preciso será o padrão final.

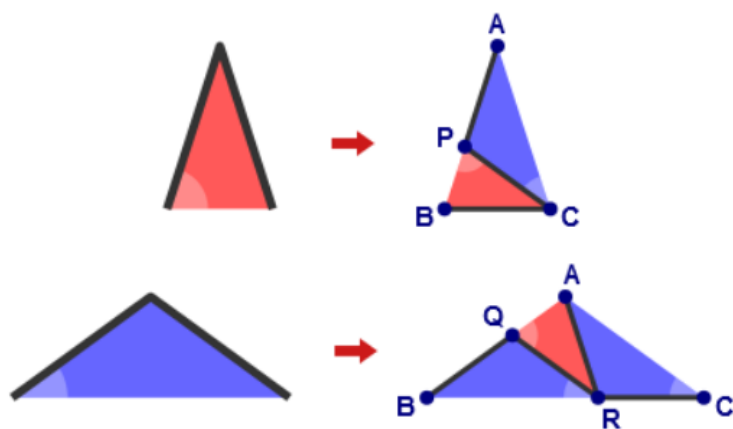


Figura 32 – Subdivisão dos tipos de triângulo.

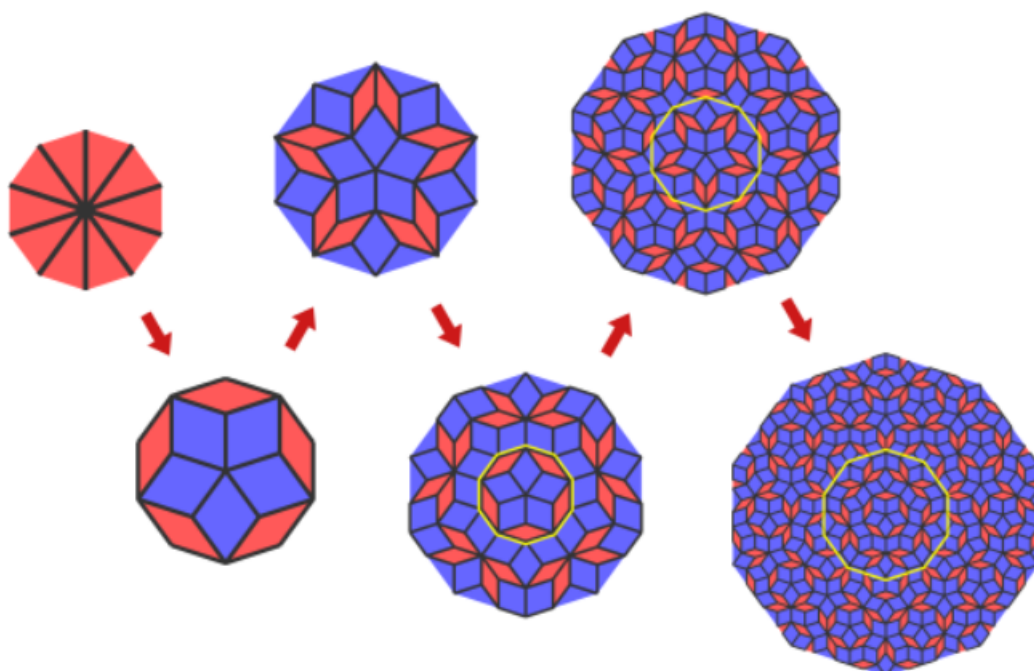


Figura 33 – Observa-se que para cada ladrilho diferente do primeiro uma cópia invertida aparece á direita. As marcações amarelas demonstram a afirmação.

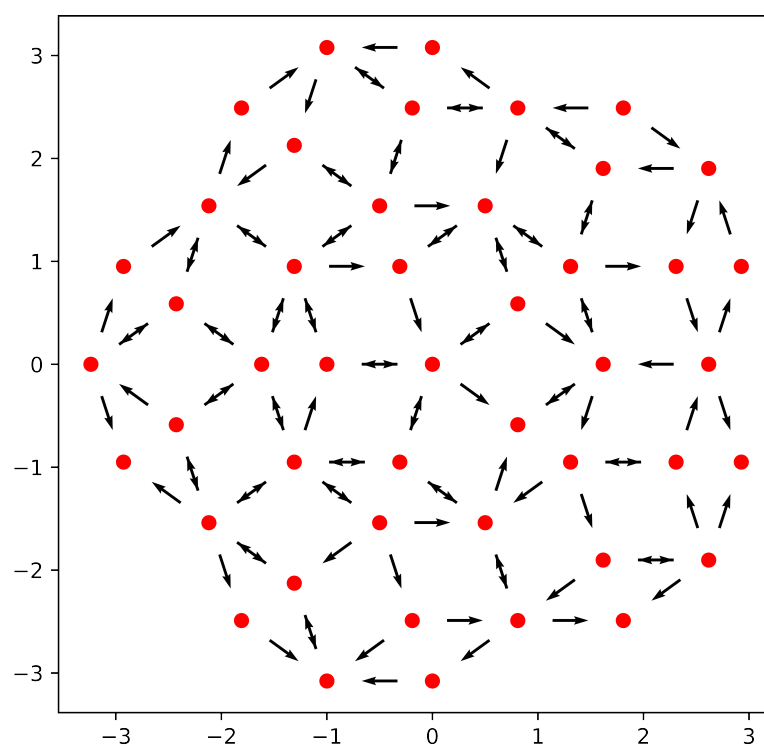


Figura 34 – Ladrilho de *Penrose* - na imagem em questão cada seta representa um spin. A rede é constituída basicamente por nanoilhas alongadas e bidimensionais, cada nanoilha é tratada como um spin tipo Ising Wysin et al. [51].